



UNIVERSIDAD DE ZARAGOZA

FACULTAD DE CIENCIAS

DEPARTAMENTO DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA

TRABAJO DE FINAL DE GRADO

## **Propiedades optoelectrónicas del grafeno**

Íñigo Arricibita Yoldi

---

Tutor:  
Luis Martín Moreno

# Índice

<b>1. Introducción</b>	<b>2</b>
1.1. Objetivos . . . . .	2
1.2. Fundamentos . . . . .	3
1.2.1. Propagación de ondas electromagnéticas en el vacío . . . . .	3
1.2.2. Cálculo de coeficientes de transmisión y reflexión, confinamiento de modos $p$ . . . . .	5
<b>2. Modelo</b>	<b>8</b>
2.1. Planteamiento: amplitud como ecuación integral . . . . .	8
2.2. Ejemplo de aplicación: defecto gaussiano . . . . .	11
<b>3. Perfil de impurezas de <math>N</math> gaussianas</b>	<b>13</b>
3.1. Aplicación del modelo . . . . .	13
3.2. Predicción en FOBA . . . . .	15
3.3. Resultados de las simulaciones . . . . .	17
3.3.1. Discretización de la ecuación integral . . . . .	17
3.3.2. Comparación FOBA analítica y de simulaciones . . . . .	19
3.3.3. Comparación FOBA y simulaciones . . . . .	20
3.3.4. Comportamiento con $a$ , anchura del defecto . . . . .	21
3.3.5. Comportamiento con $\delta$ , altura del defecto . . . . .	22
3.3.6. Comportamiento con $N$ , número de gaussianas . . . . .	23
3.3.7. Comportamiento con $\gamma$ , distancia entre gaussianas . . . . .	25
<b>4. Conclusiones</b>	<b>26</b>
<b>5. Apéndice</b>	<b>27</b>
5.1. Propiedades de la base de modos TM y TE . . . . .	27
5.2. Cálculo de la transformada de fourier en el defecto Gaussiano . . . . .	29
5.3. Cálculo de coeficiente de reflexión $R$ . . . . .	30
5.4. Cálculo de integrales con la función de Green . . . . .	31
5.5. Cálculo de la integral de una gaussiana . . . . .	32
5.6. Cálculo de la suma geométrica . . . . .	33
5.7. Cálculo del máximo de reflexión en FOBA . . . . .	33
5.8. Código MatLab . . . . .	34

# 1. Introducción

## 1.1. Objetivos

El grafeno es un material formado por una capa monoatómica de carbono formando una estructura hexagonal periódica. Su origen se remonta al grafito (cuya estructura se resolvió en 1916 [1]), que consta, esencialmente, de varias capas de grafeno; aunque éste término no se toma hasta 1987 [3]. En 1949, Philip Russel Wallace calculó la estructura de bandas de este material [2]. Según estos cálculos, se predecía que el grafeno era una estructura inestable y es por eso que se tardó en comenzar a tratar de obtener una sola lámina de grafeno. A nivel experimental, se comenzó trabajando con láminas de grafito muy finas: las primeras imágenes (tomadas por microscopio electrónico de transmisión) de grafito de pocas capas datan de 1948 [4]. Posteriormente, se llegó a detectar grafito del grosor de un átomo [5], lo que condujo al crecimiento epitaxial de grafeno en otros materiales [6]. Estos resultados de 1997, no obstante, no daban como resultado grafeno, pues para considerarlo como tal debía estar en vacío y no crecido sobre otro material (ya que entonces se produce hibridación entre los orbitales del grafeno y los del material sobre el que se crece).

No fue hasta 2004 cuando se consiguió aislar una capa de grafeno aislada. Andre Geim y Kostya Novoselov, de la universidad de Manchester, lograron aislar capas de grafeno a través de grafito mediante la técnica de «cinta adhesiva Scotch» [7]. En 2010 se les otorgó el premio Nobel por este trabajo.

Durante los últimos años se ha estudiado el grafeno debido a sus múltiples propiedades, como por ejemplo su flexibilidad y elasticidad [8] o sus altas conductividades eléctrica [9] y térmica [10]. En este trabajo nos centraremos en su capacidad como conductor de ondas electromagnéticas: desarrollaremos un modelo de propagación de plasmones de superficie en grafeno (*graphene surface plasmons*, GSP), es decir, cómo ciertos modos de ondas electromagnéticas (transversales magnéticos) pueden confinarse en la superficie del grafeno y cómo, a través de impurezas en la conductividad (bien inducidas por un potencial o bien propias del material) se puede modificar la propagación de tales plasmones. Concretamente, el estudio de este trabajo se focaliza en unas impurezas distribuidas espacialmente en forma de gaussianas para la conductividad eléctrica. Al final del trabajo, discutiremos las posibles aplicaciones de este sistema para casos experimentales.

## 1.2. Fundamentos

### 1.2.1. Propagación de ondas electromagnéticas en el vacío

El problema que se plantea es el siguiente: tenemos una onda electromagnética viajando en el vacío que llega a una superficie infinita (la lámina de grafeno). Queremos averiguar qué cantidad de esa onda se refleja y cuánta se transmite. Para ello, partamos de la base: para describir cómo se propaga una onda electromagnética nos basamos en las ecuaciones de Maxwell (sistema CGS)[11]:

$$\begin{aligned}
\nabla \cdot \mathbf{D} &= 4\pi\rho \\
\nabla \cdot \mathbf{B} &= 0 \\
\nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \\
\nabla \times \mathbf{H} &= \frac{4\pi}{c} \mathbf{J} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}
\end{aligned} \tag{1}$$

Teniendo en consideración que  $\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P}$ ,  $\mathbf{H} = \mathbf{B} - 4\pi\mathbf{M}$  y en el vacío no hay cargas ( $\rho = 0$ ) ni corrientes ( $\mathbf{J} = \mathbf{0}$ ), entonces el sistema se reduce a

$$\begin{aligned}
\nabla \cdot \mathbf{E} &= 0 \\
\nabla \cdot \mathbf{H} &= 0 \\
\nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \\
\nabla \times \mathbf{H} &= \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}
\end{aligned} \tag{2}$$

Resolver este sistema es resolver un problema de seis incógnitas: las tres componentes del campo eléctrico  $\mathbf{E}$  y las tres del campo magnético  $\mathbf{H}$ . No obstante, se puede comprobar que, en el caso del vacío, el problema se reduce sólo a dos incógnitas: las dos últimas ecuaciones relacionan directamente el rotacional de ambos campos con la derivada temporal del otro, de modo que, si tenemos uno de ellos calculado, el otro puede calcularse directamente a través de esas relaciones. Esto reduce el problema a sólo tres incógnitas (las tres del campo eléctrico o las tres del campo magnético).

Por otro lado, las dos primeras ecuaciones (divergencia del campo igual a cero) establece una relación directa entre sus tres componentes. Si, por ejemplo, tomásemos una onda plana<sup>1</sup>  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}$  tendríamos que<sup>2</sup>

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \left( \hat{u}_x \frac{\partial}{\partial x} + \hat{u}_y \frac{\partial}{\partial y} + \hat{u}_z \frac{\partial}{\partial z} \right) \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} = \mathbf{E}_0 e^{-i\omega t} (\hat{u}_x i k_x + \hat{u}_y i k_y + \hat{u}_z i k_z) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = 0,$$

como  $\mathbf{E}_0 = E_{0x}\hat{u}_x + E_{0y}\hat{u}_y + E_{0z}\hat{u}_z$  y  $\hat{u}_i \cdot \hat{u}_j = \delta_{ij}$ , entonces se tiene que

<sup>1</sup>El caso de onda plana es interesante pues, tal como veremos posteriormente, cualquier onda puede expresarse como superposición de ondas planas.

<sup>2</sup> $\hat{u}_x, \hat{u}_y$  y  $\hat{u}_z$  son los vectores de la base de  $\mathbb{R}^3$  en el espacio euclídeo.

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}_0 = 0 \Rightarrow E_{0z} = -\frac{k_x E_{0x} + k_y E_{0y}}{k_z},$$

de modo que, con saber el valor de  $\mathbf{k}$  y dos componentes del campo eléctrico, ya conocemos la tercera y, de acuerdo con lo anterior, también conocemos el campo  $\mathbf{H}$ .

Así, nuestro problema consiste en calcular las componentes  $x$  e  $y$  del campo: tenemos que calcular el vector bidimensional de componentes  $E_{0x}$  y  $E_{0y}$ . Este vector puede expresarse en una base vectorial de dimensión dos; como veremos más adelante, la base más adecuada es la de modos transversales eléctricos y magnéticos, de modo que, teniendo en cuenta que  $k_{\parallel} = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ , definimos los vectores de la base como

$$\mathbf{a}_p = \frac{1}{k_{\parallel}} \begin{pmatrix} k_x \\ k_y \end{pmatrix} \text{ (Modo transversal magnético)} \quad \mathbf{a}_s = \frac{1}{k_{\parallel}} \begin{pmatrix} -k_y \\ k_x \end{pmatrix} \text{ (Modo transversal eléctrico)} \quad (3)$$

Se puede comprobar que, para una onda transversal magnética,  $E_{0z} \neq 0$  pero que para una transversal eléctrica  $E_{0z} = 0$ . Además, estos vectores componen **una base ortonormal**<sup>3</sup>. De esta manera, una onda plana se puede expresar como

$$\mathbf{E} = \sum_{\mu} \varepsilon_{\mu} \mathbf{a}_{\mu} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)},$$

donde la suma esta extendida a los dos modos y  $\varepsilon_{\mu}$  es la componente del campo en cada uno de los vectores de la base. Si ahora aplicamos la expansión de ondas planas de Rayleigh [12], podemos expresar cualquier onda como superposición de ondas planas. Si cada una de esas ondas tiene una descomposición en la base propuesta, una onda cualquiera puede expresarse como

$$\mathbf{E} = \int d\mathbf{k} \sum_{\mu} \varepsilon_{\mu} \mathbf{a}_{\mu} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \quad (4)$$

Una identidad muy útil que cumplen los modos transversales es la siguiente (probada en el Apéndice, sección 5.1):

$$-\hat{u}_z \times \mathbf{H}^{\mu} = Y_{\mu} \mathbf{E}^{\mu}, \text{ con } Y_s = q_z \text{ e } Y_p = \frac{1}{q_z}, \quad (5)$$

donde hemos definido el vector de ondas normalizado  $\mathbf{q} = \frac{\mathbf{k}}{g}$ , con  $g = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} = \frac{\omega}{c}$ . A las cantidades  $Y_{\mu}$  las llamamos impedancias. En este caso  $\mathbf{H}^{\mu}$  y  $\mathbf{E}^{\mu}$  se refieren a los vectores en el plano  $xy$  y, además, incluimos la dependencia de onda plana en ellos.

Una vez hemos elegido la base en la que trabajaremos y hemos visto sus propiedades, pasamos a estudiar el problema de la transmisión y la reflexión de ondas a través de una lámina bidimensional (en nuestro caso, grafeno).

---

<sup>3</sup>Es decir,  $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_j = \delta_{ij}$ . Ver Apéndice, sección 5.1

### 1.2.2. Cálculo de coeficientes de transmisión y reflexión, confinamiento de modos $p$

La situación que queremos estudiar es cómo se transmite y refleja una onda que se propaga en el vacío cuando se encuentra con una lámina bidimensional (el caso del grafeno es este, una capa del grosor de un átomo de carbono).

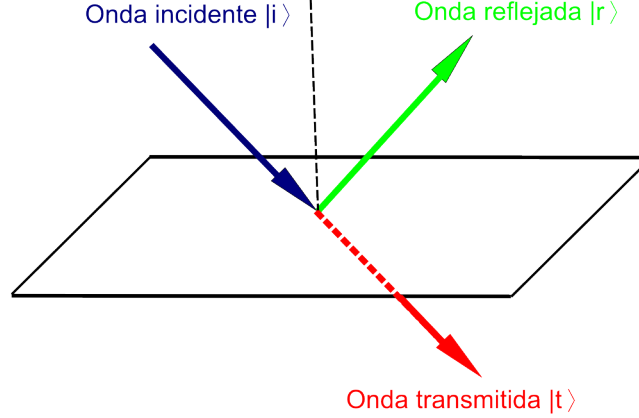


Figura 1: Esquema de transmisión y reflexión de la onda incidente

A partir de este punto emplearemos una notación diferente a la habitual, la cual nos facilitará notablemente los cálculos y la lectura. Consideremos lo siguiente: cuando escribimos una onda electromagnética de la forma (4) estamos expresándola en una base, concretamente en la base de ondas planas. Así, podemos expresar nuestra onda como la proyección de un estado perteneciente a un espacio de Hilbert  $\mathcal{H}$  en la base de ondas planas. Este tratamiento es el mismo que se hace en polarización a través del cálculo de Jones [13]. Para cada polarización tendremos:

$$|\mathbf{k}, \mu\rangle \in \mathcal{H} \ni \langle \mathbf{r} | \mathbf{k}, \mu \rangle = \mathbf{E}_\mu e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \text{ y } \langle \mathbf{k}, \mu | \mathbf{r} \rangle = \mathbf{E}_\mu e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}.$$

Además son estados ortonormales:

$$\langle \mathbf{k}', \mu' | \mathbf{k}, \mu \rangle = \langle \mathbf{k}, \mu' | \int d\mathbf{r} |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}| \mathbf{k}, \mu \rangle = \int d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} \mathbf{E}_\mu \cdot \mathbf{E}'_\mu = \delta_{\mu\mu'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'),$$

donde se ha tomado que  $\mathbb{I} = \int d\mathbf{r} |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}|$ . De esta manera, la transmisión y reflexión pueden escribirse en términos de estos elementos del espacio de Hilbert. Puede probarse que cada ket cumple por separado las siguientes relaciones:

$$\begin{aligned} |\mathbf{E}_+\rangle &= |\mathbf{E}_i\rangle + |\mathbf{E}_r\rangle = |\mathbf{k}, \mu, +\rangle + r_\mathbf{k}^\mu |\mathbf{k}, \mu, -\rangle \\ |\mathbf{E}_-\rangle &= |\mathbf{E}_t\rangle = t_\mathbf{k}^\mu |\mathbf{k}, \mu, +\rangle \end{aligned} \tag{6}$$

de manera que los signos  $+$  y  $-$  en el ket indican si la onda viaja en sentido positivo o negativo del eje  $z$  (es decir, en la dependencia de onda plana tenemos  $e^{-ik_z z}$  o  $e^{ik_z z}$ ). El sistema que referencia que tomamos tiene su origen en la lámina y toma valores positivos por debajo de ella (por donde viaja la onda transmitida) y valores negativos por encima (desde donde viene la onda incidente y hacia donde va la onda reflejada). Los coeficientes  $r_\mathbf{k}^\mu$  y  $t_\mathbf{k}^\mu$  son los coeficientes de reflexión y transmisión respectivamente. Teniendo esto en cuenta y considerando las siguientes ecuaciones de continuidad [11]:

$$\hat{u}_z \times (\mathbf{E}_+ - \mathbf{E}_-) = 0 \quad (7)$$

$$\hat{u}_z \times (\mathbf{H}_+ - \mathbf{H}_-) = \frac{4\pi}{c} \mathbf{J} = -\frac{4\pi}{c} \sigma \hat{u}_z \times (\hat{u}_z \times \mathbf{E}_+),$$

que vienen de la conservación de la componente paralela al plano del campo eléctrico y el salto que tal componente del campo magnético sufre debido a la corriente inducida en el plano, puede probarse que, teniendo en cuenta que  $\mathbf{q} = \mathbf{k}/g$  (vector de ondas normalizado en el vacío),  $\alpha = 2\pi\sigma/c$  (conductividad normalizada) y la relación (5), se llega a las siguientes expresiones para los diferentes modos:

$$\begin{aligned} r_{\mathbf{q}}^{TE,s} &= \frac{-\alpha}{\alpha + q_z}, & r_{\mathbf{q}}^{TM,p} &= \frac{-\alpha q_z}{\alpha q_z + 1} \\ t_{\mathbf{q}}^{TE,s} &= \frac{q_z}{\alpha + q_z}, & t_{\mathbf{q}}^{TM,p} &= \frac{1}{\alpha q_z + 1} \end{aligned} \quad (8)$$

Vamos a probarlo. La primera condición no es más que la continuidad de la componente paralela a la superficie del campo eléctrico, lo cual puede expresarse en términos de los coeficientes como  $1 + r_{\mathbf{q}}^\mu = t_{\mathbf{q}}^\mu$  ( $\mu \in \{s, p\}$ ). Por otro lado, si partimos de la segunda ecuación:

$$\hat{u}_z \times (\mathbf{H}_+ - \mathbf{H}_-)$$

podemos valernos de la expresión  $-\hat{u}_z \times \mathbf{H}_\mu = Y_\mu \mathbf{E}_\mu$ . No obstante, aquí hay un punto sutil: el valor de la impedancia depende de qué signo tenga  $q_z$  (pues o bien es directamente proporcional a este valor o lo es a su inversa), es decir, de en qué sentido viaje la onda en la dirección  $z$ . El sistema de referencia que nosotros marcamos tiene  $z = 0$  en la placa, por debajo de ella  $z > 0$  y por encima  $z < 0$ . De este modo, la ondas ondas incidente y transmitida viajarán en el sentido positivo del eje  $z$ , mientras que la onda reflejada viaja en el sentido negativo (lo cual introduce un signo  $-$  en la impedancia). Si tenemos esto en cuenta, poniendo  $\mathbf{H}_- = \mathbf{H}_i + \mathbf{H}_r$  y  $\mathbf{H}_+ = \mathbf{H}_t$  (indicando los índices si es onda incidente  $i$ , transmitida  $t$  o reflejada  $r$ ):

$$\hat{u}_z \times (\mathbf{H}_+ - \mathbf{H}_-) = \hat{u}_z \times (\mathbf{H}_t - \mathbf{H}_i - \mathbf{H}_r) = Y_{\mathbf{q}\mu}(-\mathbf{E}_t + \mathbf{E}_i - \mathbf{E}_r).$$

Por otra parte, si usamos la identidad vectorial  $\mathbf{a} \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = \mathbf{b} \times (\mathbf{a} \cdot \mathbf{c}) - \mathbf{c} \cdot (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})$ , y  $\alpha = \frac{2\pi}{c}\sigma$  la conductividad adimensional, se tiene que el otro lado de la ecuación queda como:

$$-\frac{4\pi}{c} \sigma \hat{u}_z \times (\hat{u}_z \times \mathbf{E}_+) = -2\alpha [\hat{u}_z (\hat{u}_z \cdot \mathbf{E}_+) - \mathbf{E}_+] = 2\alpha \mathbf{E}_+$$

Donde hemos usado que  $\mathbf{E}_+$  tiene componente  $z$  nula. Esto se ve en la propia ecuación: si tenemos ese vector igualado a  $\hat{u}_z \times \mathbf{A}$ , con  $\mathbf{A}$  cualquier vector de  $\mathbb{R}^3$ , el resultado será un vector en el espacio  $x, y$ , en  $\mathbb{R}^2$  (pues dará un vector mutuamente ortogonal a  $\hat{u}_z$  y  $\mathbf{A}$ ). Si juntamos todo lo desarrollado tendremos:

$$Y_{\mathbf{q}\mu}(-\mathbf{E}_t + \mathbf{E}_i - \mathbf{E}_r) = 2\alpha \mathbf{E}_+.$$

Expresemos ahora este resultado en la base de estados  $|\mathbf{k}, \mu\rangle$ :

$$Y_{\mathbf{q}\mu}(-|\mathbf{E}_t\rangle + |\mathbf{E}_i\rangle - |\mathbf{E}_r\rangle) = 2\alpha |\mathbf{E}_t\rangle \Rightarrow Y_{\mathbf{q}\mu}(-t_{\mathbf{q}}^\mu + 1 - r_{\mathbf{q}}^\mu) |\mathbf{k}, \mu\rangle = 2\alpha t_{\mathbf{q}}^\mu |\mathbf{k}, \mu\rangle,$$

Donde hemos obviado la parte de  $+$  y  $-$  del ket, pues se refiere al sentido de propagación de la onda en  $z$  y ya lo hemos tenido en cuenta antes. Si proyectamos sobre el bra  $\langle \mathbf{k}, \mu |$  obtenemos lo siguiente:

$$-t_{\mathbf{q}}^{\mu} + 1 - r_{\mathbf{q}}^{\mu} = \frac{2\alpha t_{\mathbf{q}}^{\mu}}{Y_{\mathbf{q}\mu}} \quad (9)$$

Como  $1 + r_{\mathbf{q}}^{\mu} = t_{\mathbf{q}}^{\mu}$ , si escribimos  $r_{\mathbf{q}}^{\mu} = t_{\mathbf{q}}^{\mu} - 1$  en (9):

$$-t_{\mathbf{q}}^{\mu} + 1 + 1 - t_{\mathbf{q}}^{\mu} = \frac{2\alpha}{Y_{\mathbf{q}\mu}} t_{\mathbf{q}}^{\mu} \Rightarrow -t_{\mathbf{q}}^{\mu} + 1 = \frac{\alpha}{Y_{\mathbf{q}\mu}} t_{\mathbf{q}}^{\mu} \Rightarrow t_{\mathbf{q}}^{\mu} = \frac{Y_{\mathbf{q}\mu}}{\alpha + Y_{\mathbf{q}\mu}}$$

Como  $r_{\mathbf{q}}^{\mu} = t_{\mathbf{q}}^{\mu} - 1$ , se tiene que

$$\boxed{t_{\mathbf{q}}^{\mu} = \frac{Y_{\mathbf{q}\mu}}{\alpha + Y_{\mathbf{q}\mu}} \quad r_{\mathbf{q}}^{\mu} = \frac{-\alpha}{Y_{\mathbf{q}\mu} + \alpha}} \quad (10)$$

Si planteamos las impedancias para cada uno de los modos, se obtienen los resultados antes expuestos:

$$\boxed{\begin{aligned} r_{\mathbf{q}}^{TE,s} &= \frac{-\alpha}{\alpha + q_z}, & r_{\mathbf{q}}^{TM,p} &= \frac{-\alpha q_z}{\alpha q_z + 1} \\ t_{\mathbf{q}}^{TE,s} &= \frac{q_z}{\alpha + q_z}, & t_{\mathbf{q}}^{TM,p} &= \frac{1}{\alpha q_z + 1} \end{aligned}}$$

Una de las consecuencias más importantes de estos resultados surge al hacerse la siguiente cuestión: **¿Es posible tener onda transmitida y reflejada sin que haya onda incidente para alguno de los modos?**. De ser así, tales ondas no vendrían de una onda incidente, sino de un plasmón superficial, una onda que se propaga por la superficie. Si nos planteamos nuevamente las ecuaciones (9) y (7) pero tomando  $|\mathbf{E}_+\rangle = r_{\mathbf{q}} |\mathbf{k}, \mu, -\rangle$  y las relaciones ya calculadas (8) sacamos dos conclusiones:

- Es imposible que una onda tipo  $s$  (transversal eléctrica) viaje como un plasmón.
- La onda tipo  $p$  (transversal magnética) puede viajar como plasmón si y sólo si  $q_z = -\frac{1}{\alpha}$ .

Para sacar la condición de plasmón  $\left(q_z = -\frac{1}{\alpha}\right)$  basta con igualar los coeficientes de reflexión y transmisión (si no hay onda incidente, estos son idénticos; basta con quitar el 1, que viene de la onda incidente, de la ecuación  $1 + r_{\mathbf{q}}^{\mu} = t_{\mathbf{q}}^{\mu}$ ).

Teniendo todo lo explicado en cuenta, desarrollaremos ahora un modelo unidimensional que trate de explicar cómo se propaga el plasmón en la superficie en presencia de defectos variables en el espacio.



## 2. Modelo

### 2.1. Planteamiento: amplitud como ecuación integral

El sistema que se plantea es el siguiente:

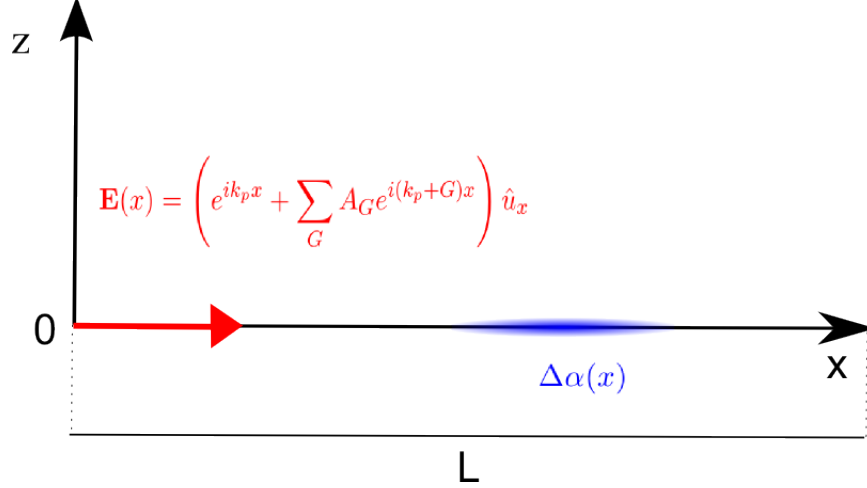


Figura 2: Esquema del modelo 1D.

Planteamos el modelo del siguiente modo: tenemos un campo eléctrico que viaja a través de la superficie del plasmón en una dirección  $x$ . Por simplicidad, planteémos que se mueve por una red periódica unidimensional finita de longitud  $L$ , de modo que el módulo del campo será de la forma

$$E(x) = e^{ik_p x} + \sum_G A_G e^{i(k_p+G)x}.$$

Por otro lado, la conductividad (normalizada) será la propia del material (en nuestro caso grafeno)  $\alpha_g$ <sup>4</sup> y el aporte que supone el defecto, el cual añade inhomogeneidades en tal conductividad de la forma  $\Delta\alpha(x)$ , siendo este parámetro la variación relativa de la conductividad. Tales inhomogeneidades pueden ser propias de defectos del material o incluso inducidas a través de un potencial eléctrico. De este modo, la conductividad del material contando con el defecto será

$$\alpha(x) = \alpha_g + \Delta\alpha(x). \quad (11)$$

Si planteamos que  $\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}$  (ley de ohm) y la segunda relación de continuidad de (7), tenemos:

$$-\hat{u}_z \times \mathbf{H}_+ + \hat{u}_z \times \mathbf{H}_- = 2\alpha(x)\mathbf{E}(x).$$

Considerando que el sistema es simétrico respecto al plano que forma la superficie de grafeno<sup>5</sup>

<sup>4</sup>La conductividad del grafeno puede obtenerse como  $\sigma = \sigma_{\text{intra}} + \sigma_{\text{inter}}$ , con  $\sigma_{\text{intra}} = \frac{2ie^2 t}{\hbar\pi\Omega} \ln \left[ 2 \cosh \left( \frac{1}{2t} \right) \right]$  y  $\sigma_{\text{inter}} = \frac{e^2}{4\hbar} \left[ \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \arctan \left( \frac{\Omega - 2}{2t} - \frac{i}{2\pi} \ln \frac{(\Omega + 2)^2}{(\Omega - 2)^2 + (2t)^2} \right) \right]$ , con  $\Omega = \hbar\omega/\mu$  y  $t = T/\mu$ , con  $T$  en unidades de energía. Para más referencias consultar [14].

<sup>5</sup>Si  $E_x$  es simétrico (que así lo hemos tomado) como la divergencia del campo es nula  $\partial_x E_x + \partial_z E_z = 0 \Rightarrow \partial_z E_z = -\partial_x E_x$ , con lo que  $E_z$  es antisimétrico. El campo, por otro lado, llevará el mismo signo que  $E_z$ , pues los campos se relacionan con el rotacional. Así, el campo  $H_y$  será positivo por encima de la placa y negativo por debajo.

$$-\hat{u}_z \times \mathbf{H}(x) = \alpha(x)\mathbf{E}(x).$$

Si ahora consideramos el desarrollo en serie de Fourier de la conductividad  $\alpha(x) = \sum_G e^{iGx} \alpha_G$ , con  $\alpha_G = \frac{1}{L} \int_0^L e^{-iGx} \alpha(x) dx$  y proyectamos sobre  $\alpha_{G+k_p} = \frac{1}{L} \int_0^L e^{-i(k_p+G)x} dx$ , recordando la relación (5):

$$-Y_0 \delta_{G0} - Y_G A_G = \alpha_G + \sum_{G'} \alpha_{G-G'} A_{G'},$$

donde hemos usado la notación  $Y_G = Y_{k_p+G} = \frac{1}{q_z(k_p+G)}$ . Por otro lado, como  $\alpha_G = \alpha_g \delta_{G0} + \Delta \alpha_G$  y, tal como hemos visto en el final de (1.2.2), para que haya confinamiento del plasmón se ha de cumplir que

$$\alpha_g = -\frac{1}{q_z(k_p)}, \quad (12)$$

considerando todo ello tenemos

$$-Y_G A_G = \Delta \alpha_G + \sum_{G'} \alpha_{G-G'} A_{G'} \Rightarrow -Y_G A_G = \Delta \alpha_G + \alpha_0 A_G + \sum_{G \neq G'} \Delta \alpha_{G-G'} A_{G'},$$

reorganizando términos:

$$(Y_G + \alpha_0) A_G + \sum_{G \neq G'} \Delta \alpha_{G-G'} A_{G'} = -\Delta \alpha_G \quad (13)$$

ó

$$(Y_G + \alpha_g) A_G + \sum_{G'} \Delta \alpha_{G-G'} A_{G'} = -\Delta \alpha_G \quad (14)$$

El tratamiento hecho hasta ahora no es realista: hemos planteado nuestra lámina de grafeno como una red unidimensional y periódica. No obstante, a raíz de este tratamiento vamos a pasar a considerar un medio continuo, lo cual sí se acerca más a la realidad<sup>6</sup>. Hacemos el paso al continuo del siguiente modo:

$$\begin{aligned} \sum_G &\rightarrow \frac{L}{2\pi} \int dG \\ \text{Definimos } A(G) = L A_G &\rightarrow \sum_G A_G = \frac{L}{2\pi} \int dG A_G = \frac{1}{2\pi} \int dG A(G) \\ \Delta \alpha(G) = L \Delta \alpha_G &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iGx} \Delta \alpha(x) dx. \end{aligned}$$

De este modo, si multiplicamos por  $L$  en (14):

$$-\Delta \alpha(G) = (Y_G + \alpha_g) A(G) + \int_{-\infty}^{+\infty} \Delta \alpha(G' - G) A(G') \frac{dG'}{2\pi} \quad (15)$$

---

<sup>6</sup>Hay que tener en cuenta que el tratamiento aquí realizado es macroscópico: la estructura hexagonal del grafeno se tiene en cuenta al calcular el valor de  $\alpha_g$ , que aquí lo consideramos como conocido.

Considerando esto, podemos expresar el módulo del campo eléctrico del siguiente modo:

$$E(x) = e^{ik_p x} + \int \frac{dG}{2\pi} A(G) e^{i(k_p + G)x} \quad (16)$$

De este modo, para resolver el problema tenemos que conocer las componentes fourier  $A(G)$  del campo. El cálculo de tales componentes a través de (15) tiene algunas complicaciones matemáticas: si por ejemplo  $A(G) \propto \delta(G - k_p)$ , entonces tenemos un  $0 \cdot \infty$  (que viene de  $(Y_G + \alpha_g) \cdot \delta(G - k_p)$ ). Para evitar estas complicaciones definimos

$$B(G) = (Y_G + \alpha_g) A(G), \quad (17)$$

de modo que la ecuación (15) y (16), si definimos  $Y_G = 1/q_z(k_p + G)$  quedan como

$$B(G) + \int_{-\infty}^{\infty} \Delta\alpha(G - G') \frac{B(G')}{Y_{G'} + \alpha_g} \frac{dG'}{2\pi} = \Delta\alpha(G) \quad (18)$$

$$E(x) = e^{ik_p x} + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dG}{2\pi} \frac{B(G)}{Y_G + \alpha_g} e^{i(k_p + G)x}$$

Podemos simplificar un poco más la notación. Si hacemos  $G = k - k_p$  y  $Y(k') = 1/q_z(k')$ , entonces en la primera ecuación de (18) tenemos

$$B(k - k_p) + \int_{-\infty}^{\infty} \Delta\alpha(k - k') \frac{B(k' - k_p)}{Y(k') + \alpha_g} \frac{dk'}{2\pi} = -\Delta\alpha(k - k_p).$$

Si, además, definimos  $\tilde{B}(k) = B(k - k_p)$  y teniendo en cuenta  $k = k_p + G$ :

$$\begin{aligned} \tilde{B}(k) + \int_{-\infty}^{\infty} \Delta\alpha(k - k') \frac{\tilde{B}(k')}{Y(k') + \alpha_g} \frac{dk'}{2\pi} &= -\Delta\alpha(k - k_p) \\ E(x) &= e^{ik_p x} + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \frac{\tilde{B}(k)}{Y(k) + \alpha_g} e^{ikx} \end{aligned} \quad (19)$$

Podemos hacer otro cambio más en estas ecuaciones si tomamos variables adimensionales. Como vimos,  $k = qg \Rightarrow dk = dqg = \frac{2\pi}{\lambda} dq$ . Si definimos

$$B(q) = \frac{1}{\lambda} B(k) \quad \text{y} \quad \Delta\alpha(q) = \frac{1}{\lambda} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-iqgx} \Delta\alpha(x) dx, \quad (20)$$

las ecuaciones (19) se reescriben como

$$\boxed{\begin{aligned} B(q) + \int_{-\infty}^{+\infty} \Delta\alpha(q - q') \frac{B(q')}{Y(q') + \alpha_g} dq' &= -\Delta\alpha(q - q_p) \\ E(x) &= e^{iq_p g x} + \int_{-\infty}^{+\infty} dq \frac{B(q)}{Y(q) + \alpha_g} e^{iqgx} \end{aligned}} \quad (21)$$

Será esta última ecuación la que utilicemos a lo largo de nuestro estudio.

## 2.2. Ejemplo de aplicación: defecto gaussiano

Un primer ejemplo de aplicación de esta teoría se puede encontrar en [15]. En este artículo se estudia, entre otros casos, la propagación de un plasmón a través de una superficie en la cual hay una impureza en la conductividad del tipo gaussiano, es decir

$$\Delta\alpha_0(x) = \delta\alpha_g e^{-\frac{4x^2}{a^2}}, \quad (22)$$

de modo que  $\delta$  da cuenta de la profundidad del defecto,  $a$  de la anchura del mismo y  $\alpha_g$  es la conductividad del grafeno. Se escogen  $\delta$  negativas, de modo que el defecto es una hendidura en la conductividad.

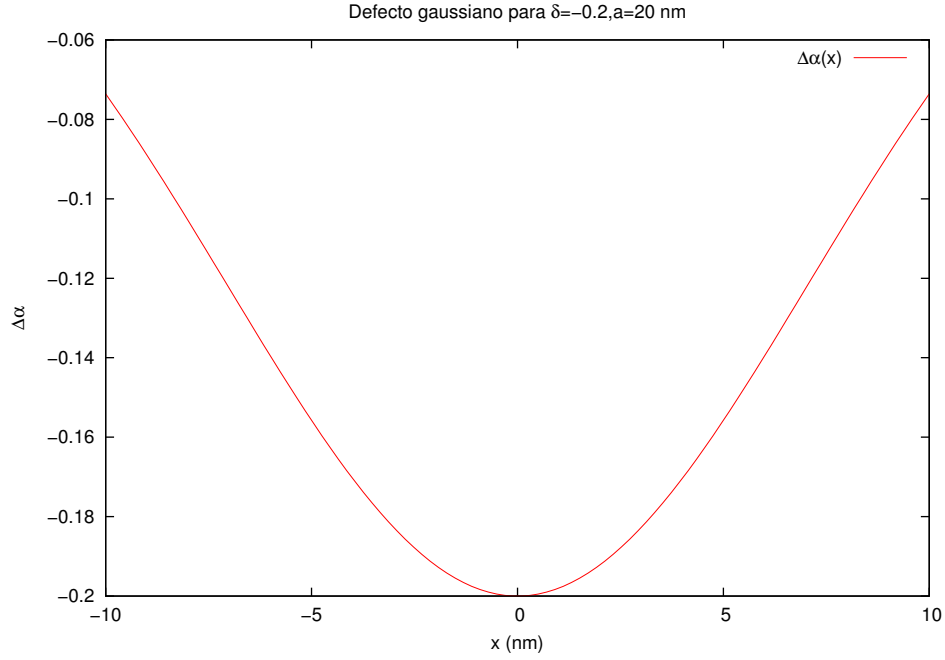


Figura 3: Distribución del defecto en la conductividad en el espacio

Para el cálculo de la amplitud  $B(q)$  del campo (sus componentes fourier, como ya hemos visto) hemos de emplear la ecuación (21) y, para ello, necesitamos calcular la transformada de fourier del defecto a través de (20), se obtiene (ver apéndice,5.2):

$$\Delta\alpha_0(q) = \frac{\delta\alpha_g}{4\sqrt{\pi}} \tilde{a} e^{-\frac{q^2 \tilde{a}^2}{16}}, \quad (23)$$

con  $\tilde{a} = g \cdot a$ . En el caso de las  $N$  gaussianas estudiaremos los cálculos con más detalle. Por otro lado, es importante plantear la *First Order Born Approximation*(FOBA), que consiste en tomar la ecuación de  $B(q)$  de (21) y despreciar el término integral. De este modo:

$$B(q) + \int_{-\infty}^{+\infty} \Delta\alpha(q - q') \frac{B(q')}{Y(q') + \alpha_g} dq' = -\Delta\alpha(q - q_p) \xrightarrow{FOBA} B^{FOBA}(q) = -\Delta\alpha(q - q_p). \quad (24)$$

A partir de aquí podemos calcular el coeficiente de treflexión (Ver Apéndice,(5.3)), pues

$$R = \left| \frac{2\pi i}{\alpha_g^3 q_p} B(-q_p) \right|^2. \quad (25)$$

Es importante matizar que los coeficientes de reflexión ( $R$ ), transmisión ( $T$ ) y escape ( $S$ ) que aquí se estudian hacen referencia al defecto, de modo que  $R$  evalúa la fracción de onda que vuelve por el plasmón tras encontrarse con el defecto,  $T$  la fracción que lo atraviesa y  $S$  la cantidad de onda que sale de la lámina de grafeno por el defecto. En el material suplementario de [15] se prueba la conservación de la carga, es decir,  $1 = R + T + S$  (la onda se refleja, se transmite o sale de la lámina). Si tomamos  $B(q) = B^{FOBA}(q)$ , obtenemos lo siguiente:

$$R_0^{FOBA} = \left| \frac{2\pi i}{\alpha_g^3 q_p} \left( -\frac{\delta\alpha_g}{4\sqrt{\pi}} \tilde{a} \exp \left( -\frac{(-2q_p)^2 \tilde{a}^2}{16} \right) \right) \right|^2 = \left| -\frac{i\sqrt{\pi}}{2\alpha_g^2 q_p} \tilde{a} \delta \exp \left( -\frac{(-2q_p)^2 \tilde{a}^2}{16} \right) \right|^2,$$

aproximando que  $\frac{1}{\alpha_g^2} = 1 - q_p^2 \approx -q_p^2$ ,<sup>7</sup> nos queda que

$$R_0^{FOBA} = \left| i \frac{\sqrt{\pi}}{2} q_p \tilde{a} \delta \exp \left( -\left\{ \frac{q_p \tilde{a}}{2} \right\}^2 \right) \right|^2 = \delta^2 \frac{\pi}{4} k_p^2 a^2 \exp \left( -\frac{(k_p a)^2}{2} \right) \quad (26)$$

Basándonos en estos resultados, estudiamos a continuación una configuración con  $N$  defectos gaussianos.

---

<sup>7</sup>Recordar que la condición de plasmón es  $q_z = -\frac{1}{\alpha}$  y que  $q_z = \sqrt{1 - q^2}$ .

### 3. Perfil de impurezas de $N$ gaussianas

#### 3.1. Aplicación del modelo

El sistema que estudiamos en este apartado consta de un defecto espacial en la conductividad en forma de  $N$  gaussianas idénticas cuyos centros están desplazados una cierta cantidad  $\gamma a$ , donde  $\gamma$  es un parámetro que controlaremos. La expresión matemática de tal defecto es:

$$\Delta\alpha(x) = \sum_{n=0}^{N-1} \Delta\alpha_n(x) \quad \text{con} \quad \Delta\alpha_n(x) = \delta\alpha_g \exp \left\{ -\frac{4(x - n\gamma a)^2}{a^2} \right\}. \quad (27)$$

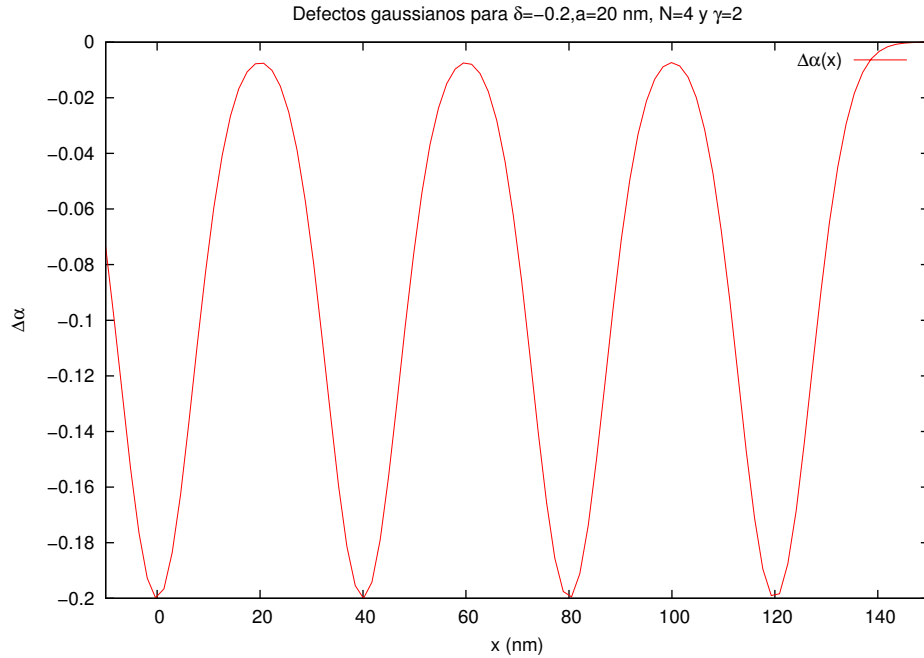


Figura 4: Distribución de  $N$  defectos en la conductividad en el espacio

Vamos a seguir el mismo procedimiento que para el caso de una gaussiana: veamos cómo calcular la transformada de fourier de la conductividad del defecto. Volviendo a usar (20):

$$\Delta\alpha(q) = \frac{1}{\lambda} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-iqgx} \Delta\alpha(x) dx \Rightarrow \Delta\alpha(q) = \sum_{n=0}^{N-1} \frac{1}{\lambda} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \Delta\alpha_n(x) e^{-iqgx}. \quad (28)$$

Veamos si podemos encontrar una expresión genérica para todos los sumandos. Si nos centramos en la parte de la integral

$$\frac{1}{\lambda} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \Delta\alpha_n(x) e^{-iqgx} = \frac{\delta\alpha_g}{\lambda} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp \left\{ -\frac{(x - n\gamma a)^2}{a^2} \right\} \exp(-iqgx).$$

Hacemos el siguiente cambio de variables:  $\tau = x - n\gamma a \Rightarrow d\tau = dx$ . Como los extremos son de integración son infinitos y las variables de integración que planteamos difieren en una constante finita, los extremos permanecen igual. De este modo obtenemos lo siguiente:

$$\begin{aligned} \frac{\delta\alpha_g}{\lambda} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp \left\{ -\frac{(x - n\gamma a)^2}{a^2} \right\} \exp(-igqx) &= \frac{\delta\alpha_g}{\lambda} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \exp \left( -\frac{4\tau^2}{a^2} \right) \exp \{ -igq(\tau + n\gamma a) \} = \\ &= \frac{\delta\alpha_g}{\lambda} \exp(-iqgn\gamma a) \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \exp \left( -\frac{4\tau^2}{a^2} - igq\tau \right) \end{aligned}$$

Para el cálculo de la integral basta con completar cuadrados en el exponente:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \exp \left( -\frac{4\tau^2}{a^2} - igq\tau \right) &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \exp \left\{ -\left( \frac{4\tau^2}{a^2} + 2 \cdot \frac{2\tau}{a} \cdot \frac{igqa}{4} - \frac{q^2 g^2 a^2}{16} + \frac{q^2 g^2 a^2}{16} \right) \right\} = \\ &= \exp \left( -\frac{q^2 g^2 a^2}{16} \right) \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \exp \left\{ -\left( \frac{2\tau}{a} + \frac{igq}{4a} \right)^2 \right\} \end{aligned}$$

Si en la integral que queda hacemos el cambio  $u = \frac{2\tau}{a} + \frac{igq}{4a} \Rightarrow du = \frac{2}{a}d\tau$  y teniendo en cuenta que  $\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-x^2} = \sqrt{\pi}$  (Ver 5.5):

$$\frac{\delta\alpha_g}{\lambda} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp \left\{ -\frac{(x - n\gamma a)^2}{a^2} \right\} \exp(-igqx) = \delta\alpha_g \frac{\tilde{a}}{4\sqrt{\pi}} \exp \left( -\frac{q^2 \tilde{a}^2}{16} \right) \exp(-iqgn\gamma a) = \Delta\alpha_0(x) \exp(-iqgn\gamma a), \quad (29)$$

con  $\tilde{a} = ga$ . Si volvemos con este resultado a (28):

$$\Delta\alpha(q) = \sum_{n=0}^{N-1} \exp(-igqnl) \Delta\alpha_0(g) = \Delta\alpha_0(q) \sum_{n=0}^{N-1} \exp(-igqnl).$$

Recordando la expresión de la suma geométrica  $S = \sum_{n=0}^M r^n \Rightarrow S = \frac{r^{M+1} - 1}{r - 1}$  (Ver (5.6)), en nuestro caso  $r = \exp(-igq\gamma a)$  y  $M = N - 1$ , de manera que:

$$\Delta\alpha(q) = \Delta\alpha_0(g) \frac{\exp(-igqN\gamma a) - 1}{\exp(-igq\gamma a) - 1}.$$

Si sacamos factor común en el numerador  $\exp \left( -\frac{igqN\gamma a}{2} \right)$  y  $\exp \left( -\frac{igq\gamma a}{2} \right)$  y considerando que  $\sin \alpha = \frac{1}{2i}(e^{i\alpha} - e^{-i\alpha})$ , se obtiene que

$$\boxed{\Delta\alpha(q) = \Delta\alpha_0(q) \exp \left\{ -\frac{igq(N-1)\gamma a}{2} \right\} \frac{\sin \left( \frac{gqN\gamma a}{2} \right)}{\sin \left( \frac{gq\gamma a}{2} \right)} = \Delta\alpha_0(q) \xi(q),} \quad (30)$$

con  $\xi(q)$  el factor de estructura, definido como

$$\boxed{\xi(q) = \exp \left\{ -\frac{igq(N-1)\gamma a}{2} \right\} \frac{\sin \left( \frac{gqN\gamma a}{2} \right)}{\sin \left( \frac{gq\gamma a}{2} \right)}} \quad (31)$$

Es importante ver que este factor de estructura  $\xi(q)$  surgirá **siempre que tengamos una estructura periódica de defectos**, de modo que sus propiedades son extrapolables a cualquier tipo de variación en la conductividad siempre que ésta sea periódica.

A partir de este resultado podemos estudiar el sistema. El primer paso será considerar la *First Order Born Approximation*.

### 3.2. Predicción en FOBA

Del mismo modo que para una gaussiana, podemos aproximar en FOBA a través de la ecuación (24). De este modo, el coeficiente de reflexión en tal aproximación, dado por (25) será

$$R = \left| \frac{2\pi i}{\alpha_g^3 q_p} B(-q_p) \right|^2 \Rightarrow R^{FOBA} = \left| -\frac{2\pi i \Delta \alpha_0(-2q_p)}{\alpha_g^3 q_p} \xi(-2q_p) \right|^2.$$

Como  $|a \cdot b| = |a| \cdot |b| \forall a, b \in \mathbb{C}$ , podemos escribir

$$R^{FOBA} = \left( \left| -\frac{2\pi i \Delta \alpha_0(-2q_p)}{\alpha_g^3 q_p} \right| |\xi(-2q_p)| \right)^2 = \left| -\frac{2\pi i \Delta \alpha_0(-2q_p)}{\alpha_g^3 q_p} \right|^2 |\xi(-2q_p)|^2 = R_0^{FOBA} |\xi(-2q_p)|^2,$$

donde, como hemos expresado en la ecuación, la primera parte ha sido calculada para el caso de una sola gaussiana. Con respecto al término del factor de estructura:

$$|\xi(-2q_p)|^2 = \left| \exp \{ igq_p(N-1)\gamma a \} \frac{\sin(gq_p N \gamma a)}{\sin(gq_p \gamma a)} \right|^2 = \left( |\exp \{ igq_p(N-1)\gamma a \}| \left| \frac{\sin(gq_p N \gamma a)}{\sin(gq_p \gamma a)} \right| \right)^2.$$

Como  $z = |z|e^{i\theta} \forall z \in \mathbb{C}$ , el módulo de un número complejo que consta de una exponencial imaginaria es uno. Por lo tanto, teniendo esto en cuenta, el resultado final será

$$\boxed{R^{FOBA} = R_0^{FOBA} \frac{\sin^2(gq_p N \gamma a)}{\sin^2(gq_p \gamma a)}} \quad (32)$$



A partir de esta primera aproximación podemos comprobar cómo cambia la reflexión en este sistema respecto al de una gaussiana, estudiado en profundidad en ([15]). Si representamos gráficamente para  $N = 1, 2, 3$  y 4 se obtiene el siguiente gráfico:

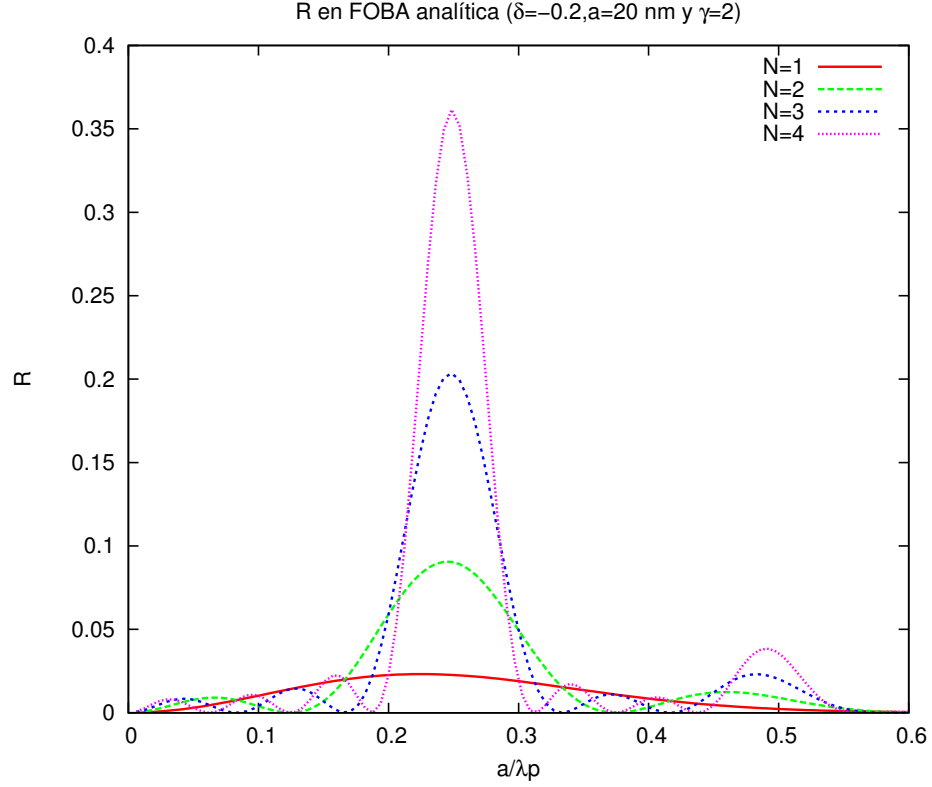


Figura 5: Coeficiente de reflexión en FOBA para  $N=1,2,3$  y 4.

En nuestro caso, con  $N = 1$  recuperamos el caso ya conocido. Se aprecia que, además de un pico que crece en magnitud y va haciéndose más estrecho conforme  $N$  aumenta, también surgen picos secundarios para longitudes de onda del plasmón cercanas a la principal. De hecho, a cada lado del pico principal aparecen  $N - 1$  máximos secundarios.

El hecho de que el pico vaya aumentando conforme lo hace  $N$  viene de la indeterminación en el factor de estructura  $\xi(q)$  que se da cuando el argumento del seno del denominador se hace nulo. Veámoslo:

$$\xi(q) = \exp \left\{ -\frac{igq(N-1)\gamma a}{2} \right\} \frac{\sin \left( \frac{gqN\gamma a}{2} \right)}{\sin \left( \frac{gq\gamma a}{2} \right)} \text{ si } \frac{gq\gamma a}{2} = m\pi, \text{ con } m \in \mathbb{Z} \implies \xi(q) \propto \frac{\sin(Nm\pi)}{\sin(m\pi)} = \frac{0}{0}.$$

Si hacemos el límite en el cual numerador y denominador tienden a cero:

$$\lim_{gq\gamma a \rightarrow 2m\pi} \frac{\sin \left( \frac{gqN\gamma a}{2} \right)}{\sin \left( \frac{gq\gamma a}{2} \right)} \approx \lim_{gq\gamma a \rightarrow 2m\pi} \frac{\frac{gqN\gamma a}{2}}{\frac{gq\gamma a}{2}} = N,$$

De modo que el factor de reflexión  $R$  tiene un pico proporcional a  $N^2$ , pues es proporcional al cuadrado del cociente del seno del doble del ángulo (Que también converge a  $N$  en la indeterminación).

### 3.3. Resultados de las simulaciones

#### 3.3.1. Discretización de la ecuación integral

Si vamos a la ecuación integral que hemos de resolver para las componentes Fourier  $B(q)$  del campo eléctrico (21), podemos escribirla de este modo:

$$\Delta\alpha(q - q_p) = -B(q) - \int_{-\infty}^{+\infty} \Delta\alpha(q - q')G(q')B(q')dq', \quad (33)$$

con

$$G(q) = \frac{1}{Y(q) + \alpha_g} \quad (34)$$

la **función de green**. De este modo, introduciendo la delta de Dirac, que verifica  $\int_{-\infty}^{+\infty} dx f(x)\delta(x - x_0) = f(x_0)$ , podemos escribir  $B(q) = \int_{-\infty}^{+\infty} dq' B(q')\delta(q - q')$ . De este modo, la ecuación (33) queda

$$\Delta\alpha(q - q_p) = - \int_{-\infty}^{+\infty} dq' [B(q')\delta(q - q') + \Delta\alpha(q - q')G(q')B(q')] = - \int_{-\infty}^{+\infty} dq' B(q') [\delta(q - q') + \Delta\alpha(q - q')G(q')].$$

Si ahora discretizamos la ecuación, es decir,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \longrightarrow \sum_{q'=-\infty}^{+\infty}$$

$$dq' \longrightarrow \Delta q'$$

$$\delta(q - q') \longrightarrow \delta_{qq'} \quad (\text{De delta de Dirac a delta de Kronecker}),$$

obtenemos

$$\Delta\alpha(q - q_p) = - \sum_{q'=-\infty}^{+\infty} \Delta q' B(q') (\delta_{qq'} + \Delta\alpha(q - q')G(q')). \quad (35)$$

Definimos ahora las siguientes matrices y vectores:

$$\text{Vector } \mathbf{F} : F_q = \Delta(q - q_p)$$

$$\text{Vector } \mathbf{B} : B_{q'} = B(q') \quad (36)$$

$$\text{Matriz } \tilde{M} : M_{qq'} = (\delta_{qq'} + \Delta\alpha(q - q')G(q'))\Delta q'.$$

La ecuación (36) se expresa como

$$\mathbf{F} = \tilde{M}\mathbf{B} \quad (37)$$

De modo que, para cada  $q$  (cada iteración), calcularemos la amplitud  $\mathbf{B}$  a través de la inversa de  $\tilde{M}$ :

$$\mathbf{B} = \tilde{M}^{-1}\mathbf{F}. \quad (38)$$

Con esta ecuación ya discretizada podemos programar un código que la resuelva (ver Apéndice, apartado 5.8). A la hora de hacerlo, es muy importante determinar cómo es el integrando. Por ejemplo, la función de Green tiene un polo en  $q_z = \sqrt{1-q^2} = -1/\alpha_g$ , de modo que, en tal polo, es necesario disminuir el intervalo de integración, pues la función varía mucho más bruscamente.

En el caso que nos ocupa (el de  $N$  gaussianas), la única dificultad añadida al integrando es la indeterminación  $\frac{0}{0}$  del factor de estructura para valores de  $q$  tales que  $gq\gamma a = 2m\pi$ . Sabemos que, para esos valores, el factor de estructura vale  $N$  (tal y como hemos visto al final de la sección 3.2). De ese modo, basta con añadir un condicional en el código de la siguiente forma a la hora de generar el vector  $\mathbf{F}$  y la matriz  $\tilde{M}$ :

```
%F vector and M matrix generator
for i=1:2*N
    if rem(gamma*(real(q(i))-real(qp))*g*a/2,pi)==0

        F(i)=1/(4*sqrt(pi))*alphaG*g*a*exp(-(q(i)-qp)^2*(a*g)^2/16)*delta*NumGauss;

    else

        F(i)=1/(4*sqrt(pi))*alphaG*g*a*exp(-(q(i)-qp)^2*(a*g)^2/16)*delta*exp(-1i*gamma*(q(i)-qp)*a*g*(NumGauss-1)/2)*sin(NumGauss*gamma*(q(i)-qp)*a*g/2)/sin(gamma*(q(i)-qp)*a*g/2);

    end
    G(i,i)=qz(i)/(1+alphaG*qz(i))*dq(i);
    G1(i)=qz(i)/(1+alphaG*qz(i));
    Q1(i,i)=1;
end
% For any reason, M matrix is generated faster whether it is defined as the
% product of two matrix
for i=1:2*N;
    for j=1:2*N;
        if rem(gamma*(real(q(i))-real(q(j)))*g*a/2,pi)==0
            M1(i,j)=-1/(4*sqrt(pi))*alphaG*a*g*exp(-(q(i)-q(j))^2*(a*g)^2/16)*delta*NumGauss;
        else
            M1(i,j)=-1/(4*sqrt(pi))*alphaG*a*g*exp(-(q(i)-q(j))^2*(a*g)^2/16)*delta*exp(-1i*gamma*(q(i)-q(j))*a*g*(NumGauss-1)/2)*sin(NumGauss*gamma*(q(i)-q(j))*a*g/2)/sin(gamma*(q(i)-q(j))*a*g/2);
        end
    end
end
M=M1*G;
}
```

donde  $\text{rem}(a,b)$  es la función de resto. Así, si la cantidad  $gq\gamma a$  es un múltiplo de  $\pi$  (es decir,  $\text{rem}(gq\gamma a, \pi)=0$ ), sustituimos el factor de estructura por  $N$  (en el caso del código, `NumGauss`).

### 3.3.2. Comparación FOBA analítica y de simulaciones

En este apartado comprobaremos que la corrección introducida en el código para el defecto de  $N$  gaussianas es correcta: modificamos el código para que calcule la FOBA, de modo que comentamos todas las operaciones que involucran a la matriz  $\tilde{M}$  e identificamos los vectores  $\mathbf{F} = \mathbf{B}$ , lo cual es equivalente a quitar la integral de la ecuación (notar que ésta sólo aparece en la matriz  $\tilde{M}$ ). Si comparamos los resultados de las simulaciones con el cálculo analítico de la sección 3.2, obtenemos lo siguiente:

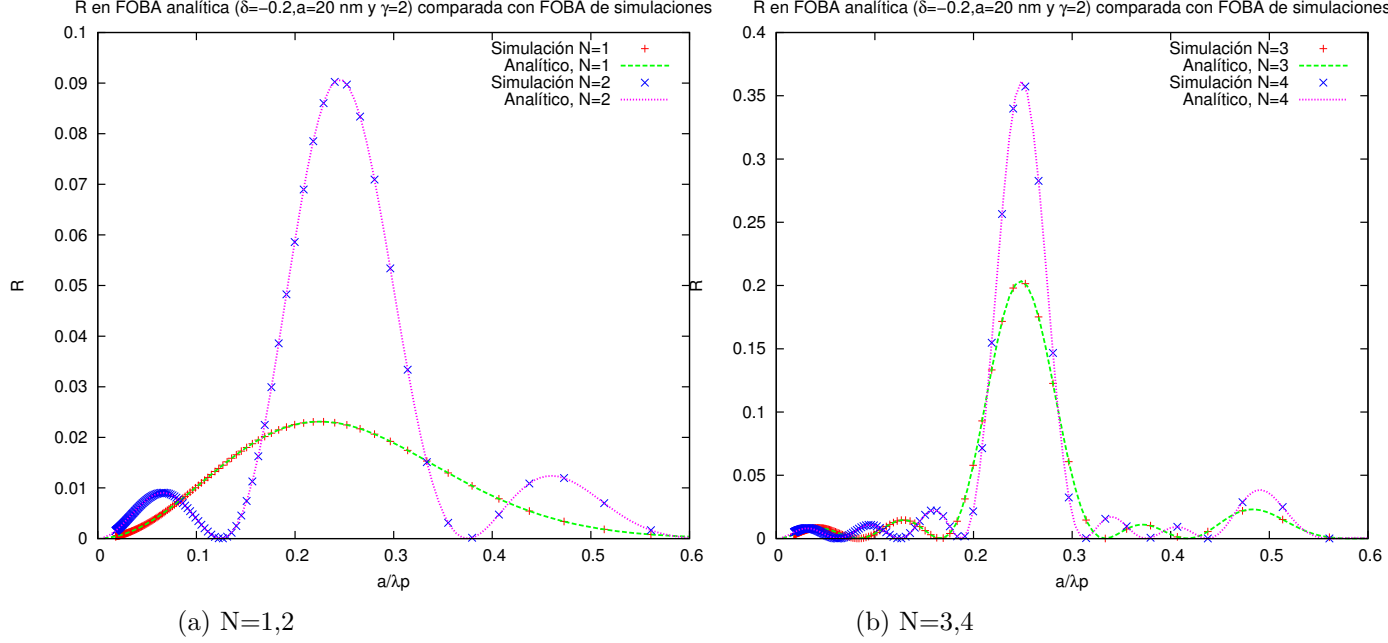


Figura 6: Comparación FOBA analítica y con simulación

Se aprecia una perfecta concordancia de las simulaciones con el resultado analítico. Con esto comprobamos que la implementación de la modificación para un sistema periódico de  $N$  defectos se ha hecho correctamente en el código. Pasemos ahora a estudiar casos sin aproximación: incluimos el término integral en la ecuación.

### 3.3.3. Comparación FOBA y simulaciones

A continuación comparamos las predicciones de la FOBA con las simulaciones (incluyendo el término integral). Los resultados son los siguientes

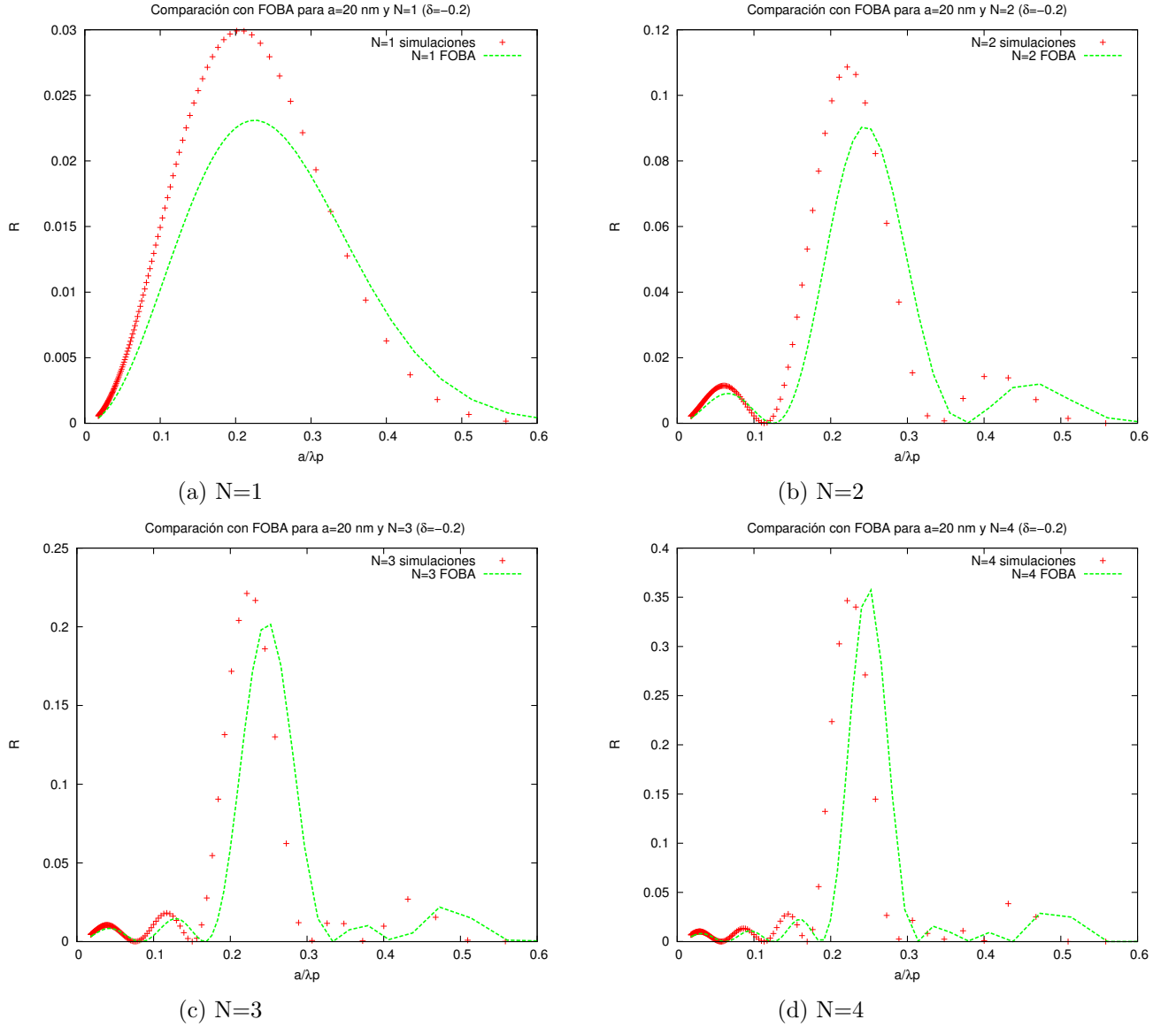


Figura 7: Comparación de FOBA con los resultados de la simulación

Aquí los resultados empeoran: el aspecto de la función es similar, pero se ve un cierto desplazamiento en el eje de abscisas, así como unas formas más irregulares en las simulaciones (aunque esto no es debido a la imprecisión de la aproximación, sino a la resolución de la simulación). Aún así, se aprecia que la forma funcional es similar (pico resonante de alta magnitud y picos secundarios). Esto nos permite estudiar la aproximación FOBA y traspasar las conclusiones a los casos reales teniendo en cuenta este desplazamiento en las longitudes de onda.

### 3.3.4. Comportamiento con $a$ , anchura del defecto

Al igual que en [15], realizamos simulaciones variando la anchura  $a$  de los defectos gaussianos. El resultado que obtenemos es el siguiente

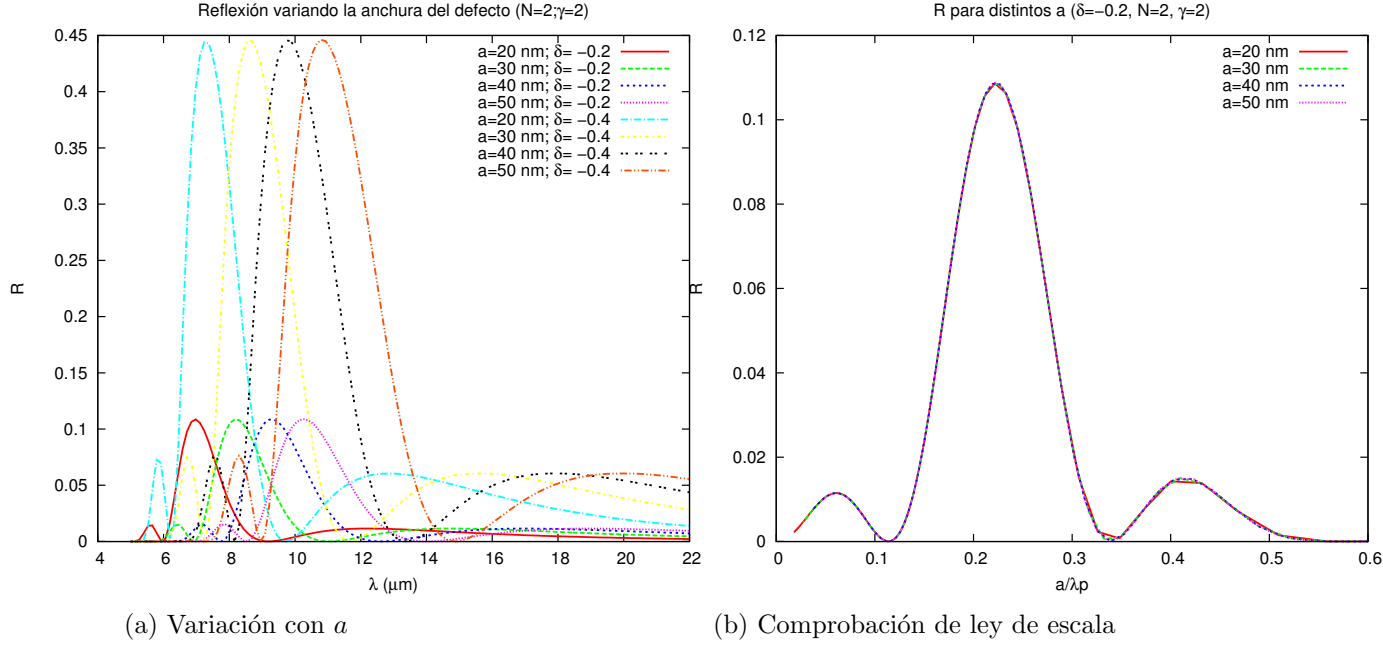


Figura 8: Variación del coeficiente de reflexión  $R$  con la anchura de las gaussianas  $a$

Se aprecia que, conforme aumentamos la anchura  $a$ , los picos se desplazan hacia longitudes de onda mayores (resultado que ya se reproducía en [15] para  $N=1$ ). Para explicar esto es necesario conocer el origen del pico de reflexión: tal pico es debido a la resonancia de la onda que viene del vacío (de longitud de onda  $\lambda$ ) con el defecto de anchura  $a$ . De este modo, si aumentamos la anchura  $a$  la longitud de onda resonante  $\lambda$  será mayor: las longitudes de onda que resuenan son más largas dado que la anchura crece.

Por otro lado, si representamos la reflexión en función de  $a/\lambda_p$  se ve que las gráficas se superponen entre sí. Esto puede apreciarse en la expresión de la FOBA: cumple una ley de escala según la magnitud  $a/\lambda_p$ .

También se presentan resultados para dos  $\delta$  diferentes. Lógicamente, conforme  $\delta$  (profundidad del defecto) es mayor, la reflexión es mayor pues, como vemos en la aproximación FOBA (26), el coeficiente de reflexión es proporcional a  $\delta^2$ . Veamos ahora más resultados de simulaciones con variaciones en este parámetro.

### 3.3.5. Comportamiento con $\delta$ , altura del defecto

Los resultados de los simulaciones para un número de gaussianas  $N = 2$  y  $3$ , anchura del defecto  $a = 20$  nm y una distancia relativa entre gaussianas  $\gamma = 2$  variando  $\delta$  son

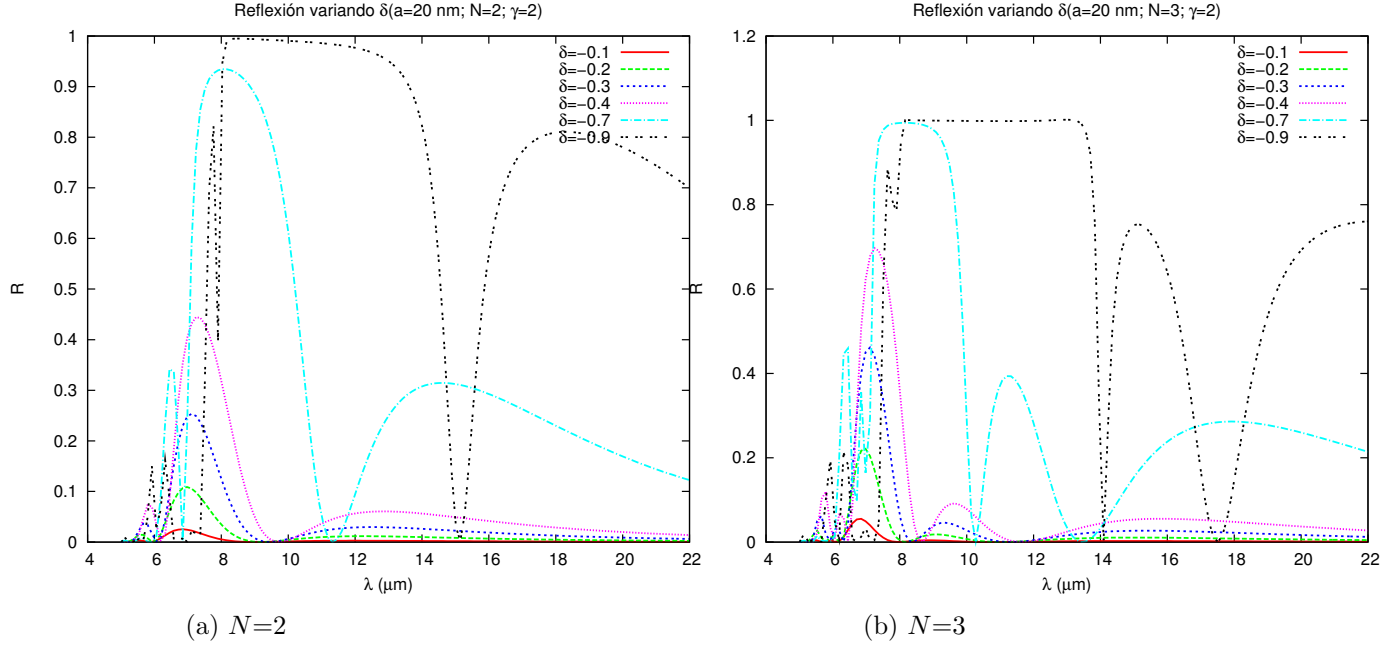


Figura 9: Variación del coeficiente de reflexión  $R$  con la altura de las gaussianas  $\delta$ .

Vemos que llega un punto de la profundidad ( $\delta = -0.7, -0.9$ ) en el cual la forma de la gráfica cambia: se va ensanchando el pico central y subiendo su intensidad hasta que rebasa llega justo al 1 ( $R$  no puede ser mayor que 1, pues significa que se refleja más energía de la que entra en el defecto). Un resultado similar se reproduce en [15], donde se usan defectos de anchura mucho mayor (en torno a los micrómetros). Como veremos en el apartado 4, podemos encontrar aplicaciones en este fenómeno, las cuales involucran defectos en esa escala.

### 3.3.6. Comportamiento con $N$ , número de gaussianas

Las simulaciones para  $a = 20$  nm,  $\delta = -0.2$  y  $\gamma = 2$  para distintos  $N$  son las siguientes:

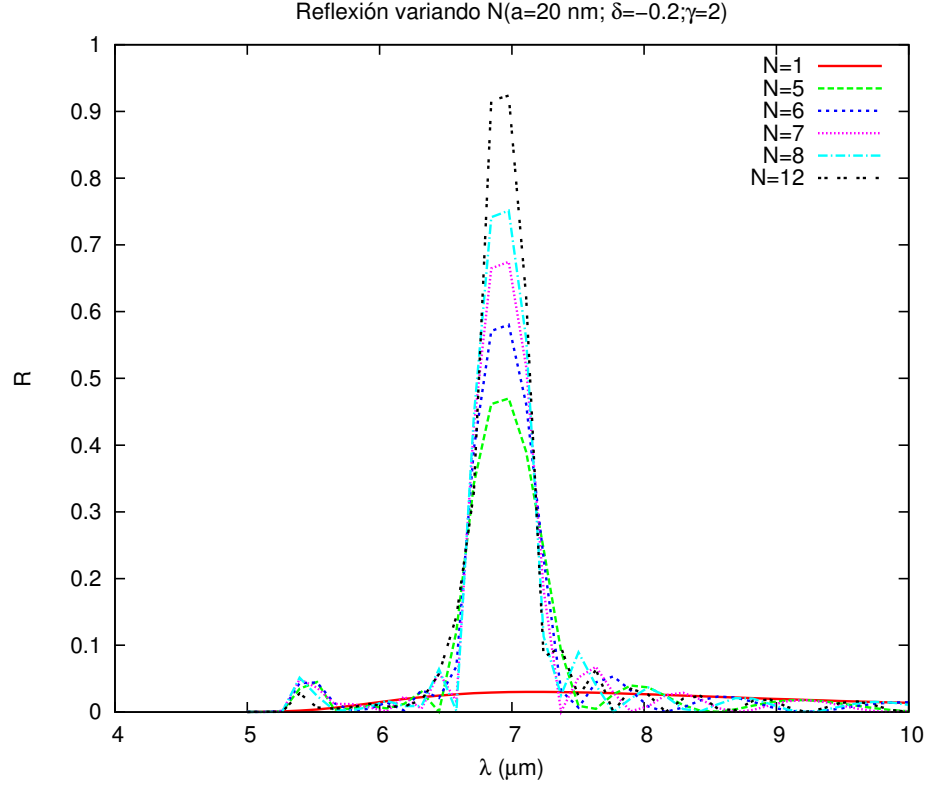


Figura 10: Variación del coeficiente de reflexión  $R$  con el número de gaussianas.

Los resultados son similares a los que habíamos predicho para FOBA en la parte analítica: el pico va creciendo conforme aumenta el valor de  $N$  y, además, se va estrechando. No sólo eso, sino que van apareciendo más máximos secundarios ( $N - 1$  a cada lado), aunque estos varían su intensidad en mucha menor magnitud que el pico central (el correspondiente a la indeterminación  $\frac{0}{0}$  ya comentada).

Algo llamativo de estos resultados es que, como ya vimos en 3.2, el máximo de la reflexión es proporcional a  $N^2$ , de modo que la reflexión puede ser arbitrariamente grande (dado que podemos usar un número  $N$  arbitrariamente grande). Esto dará lugar a que, para un cierto  $N$ , el valor  $R$  rebasará la unidad.

Podemos estimar a través de la FOBA en qué valor de  $N$  ocurre esto. Sabemos que, en el máximo, el factor de estructura aporta a la reflexión un valor  $N^2$ , de manera que

$$R_{\text{máx}}^{\text{FOBA}} = R_{0,\text{máx}}^{\text{FOBA}} N^2.$$

Si analizamos la función  $R_0^{\text{FOBA}}$  (ver Apéndice, sección 5.7) podemos extraer que ésta tiene un máximo para  $a/\lambda_p = 1/\sqrt{2\pi} \approx 0,22$ , lo que da lugar a un valor de la reflexión  $R_{0,\text{máx}}^{\text{FOBA}} \approx 0,58\delta^2$ . Si elegimos  $\delta = -0,2$ , tendremos, juntando con el factor de estructura, que

$$R_{\text{máx}}^{\text{FOBA}}(N) = 0,0232N^2.$$

Así, si calculamos este valor para una serie de  $N$ :



$R_{\text{máx}}^{FOBA}$	$N$
0,02	1
0,09	2
0,21	3
0,37	4
0,58	5
0,84	6
<b>1,14</b>	<b>7</b>
1,48	8
1,88	9
2,32	10

Cuadro 1: Valores de  $R_{\text{máx}}^{FOBA}$  em función de  $N$ .

Como vemos, para el valor de  $N=7$  ya se rebasa la unidad y se pierde el sentido físico del factor de reflexión. Sin embargo, nuestras simulaciones llegan hasta  $N = 12$  y no se aprecia esta divergencia. La razón es la resolución de la simulación: conforme  $N$  aumenta, el pico no sólo se hace más intenso, sino que también se hace más estrecho, de modo que es mucho más costoso detectarlo en términos de resolución. De este modo, no lo detectamos porque nuestra discretización no lo capta, para verlo necesitaríamos unas simulaciones con una resolución mucho más baja (aquí hemos utilizado  $\delta\lambda \approx 0,13\text{nm}$ )<sup>8</sup>.

Por otro lado, podemos dar una visión intuitiva de los máximos de reflexión que tenemos: estos se deben a la resonancia del plasmón con el defecto, de modo que, si añadimos más defectos de la misma anchura (con la cual resuena y provoca el máximo), o sea, incrementamos  $N$ , la intensidad de esta reflexión aumenta, pues resuena con más defectos. Por otro lado, la aparición de los máximos secundarios es una combinación de otros modos de resonancia: el plasmón puede resonar entre los centros de cada una de las gaussianas, de manera que da lugar a modos mixtos (entre diferentes defectos) de resonancia.

---

<sup>8</sup>En realidad la resolución varía según la zona que integremos, tal como comentábamos al comienzo. De hecho, integramos en la variable adimensional  $q$ .

### 3.3.7. Comportamiento con $\gamma$ , distancia entre gaussianas

A continuación representamos el comportamiento de un defecto con  $N = 2$ ,  $a = 20\text{nm}$ ,  $\delta = -0,2$  y  $\gamma$  cambiando:

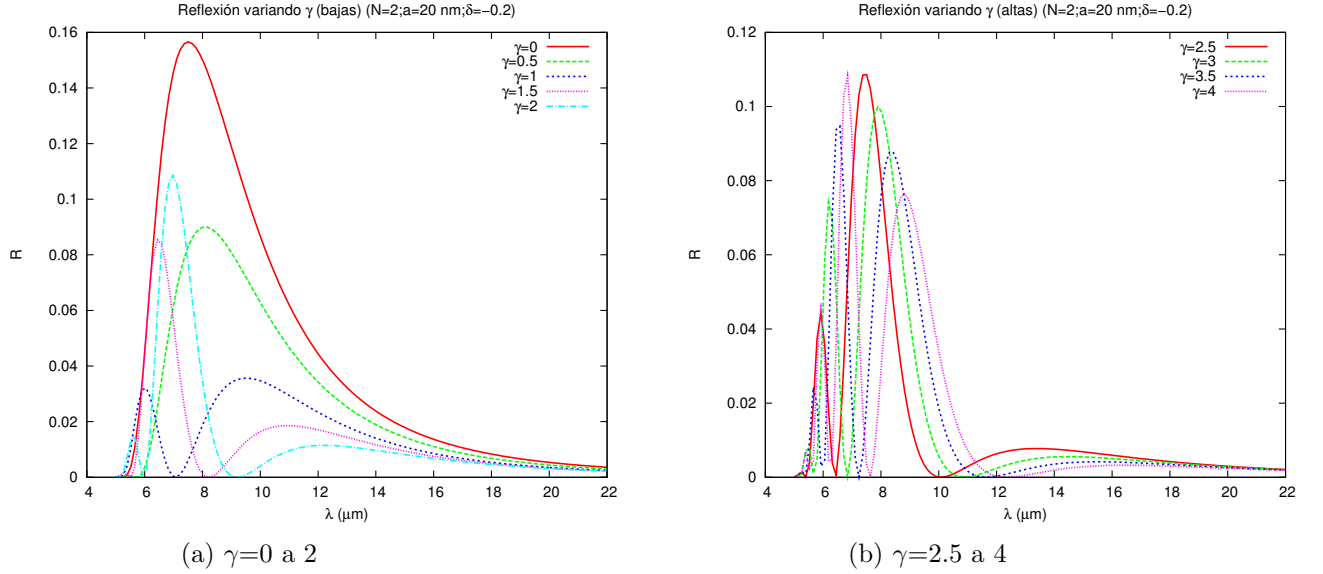


Figura 11: Variación del coeficiente de reflexión  $R$  con la distancia relativa entre gaussianas.

Para  $\gamma = 0$  simplemente tenemos la superposición de dos gaussianas en el mismo punto. Conforme vamos aumentando este parámetro las gaussianas se van separando: hasta  $\gamma = 1$  todavía están cerca y se superponen, formando una gaussiana de más anchura. Después, ya en  $\gamma = 2$ , están lo suficientemente separadas y recuperamos la forma ya estudiada previamente.

Los resultados para  $\gamma$  a partir de 2.5 reflejan que, conforme aumentamos la distancia entre gaussianas, el pico principal va disminuyendo poco a poco su intensidad y el secundario aumenta, además de que ambos sufren un desplazamiento hacia la derecha en la longitud de onda.

La fenomenología de estos resultados es que, conforme separamos los picos, los modos mixtos (los que se provocan por la resonancia entre los centros de las dos gaussianas) van cambiando su longitud de onda, pues los defectos están cada vez más alejados (de hecho, conforme  $\gamma$  aumenta la longitud de onda resonancia lo hace también, lo que concuerda con esta explicación). El hecho de que el pico principal baje de intensidad se debe a que los defectos ya no están tan próximos y los plasmones reflejados no se superponen de inmediato igual que para  $\gamma$  bajas. Esto también puede explicarse por qué el pico del modo mixto aumenta: el plasmón reflejado de la segunda gaussiana interfiere con él antes de juntarse con el de la primera y aporta ese incremento que detectamos.

## 4. Conclusiones

En esta sección vamos a comentar los resultados obtenidos y su posible aplicación en los métodos experimentales en los que se emplea el grafeno.

### ■ Grafeno formado en sustrato de SiC

En [16] se realiza un estudio en el cual se consiguen hacer defectos del orden de los nanómetros. De ese modo, la simulación de defectos con  $a = 20, 30, 40$  ó  $50$  nm puede reflejar el sistema propuesto en [16]. Resumamos los resultados obtenidos:

1. Aumentar la anchura del defecto  $a$  provoca un desplazamiento en la longitud de onda resonante que se refleja.
2. Aumentar el número de defectos  $N$  provoca un aumento del pico resonante y un estrechamiento del mismo, así como la aparición de picos secundarios.
3. Aumentar la distancia relativa entre defectos  $\gamma$  provoca una disminución del pico principal y un aumento de los secundarios, así como un desplazamiento en la longitud de onda de ambos tipos de picos.
4. Aumentar la profundidad del defecto  $\delta$  provoca un incremento en la intensidad.

En base a esto, podríamos manipular las condiciones de nuestro sistema para controlar la radiación reflejada. A través del desplazamiento de la longitud de onda con  $a$ , podemos seleccionar longitudes de onda de interés en las cuales colocar el pico principal. Por otro lado, si aumentamos  $N$  aumentamos la intensidad de esta onda y además la monocromatizamos más, pues el pico se estrecha: pese a que aparezcan máximos secundarios, si  $N$  es lo suficientemente grande podríamos considerar esta reflexión como despreciable. La variación en  $\gamma$  permite poner (en el caso, por ejemplo, de  $N=2$ ) dos longitudes de onda reflejadas al mismo nivel de intensidad. De este modo, podemos tener dos ondas reflejadas y controlar su posición en el espectro a través de  $a$ . En este caso, si quisiésemos aumentar la intensidad deberíamos variar  $\gamma$ , pues aumentarla con  $N$  supondría la aparición de más picos.

Así pues, a través del sistema periódico aquí presentado podemos manipular la onda reflejada en el defecto en longitud de onda, resolución en la longitud de onda (cómo de monocromática es), intensidad y reflexión múltiple (varias longitudes de onda).

### ■ Uniones p-n-p en grafeno

En los artículos [17] y [18] se fabrican uniones p-n-p basadas en grafeno cuya concentración de portadores (y, por lo tanto, su conductividad eléctrica) se modifica a través de un potencial externo. En este caso, las condiciones de laboratorio que se reflejan en nuestros parámetros son una variación de  $\delta$  entre 0 y -0.9 y unos defectos cuya anchura  $a$  es del orden de micrómetros.

Pese a que nuestras simulaciones han sido realizadas para anchuras de defecto bajas (del orden de nanómetros), los resultados que ahora explicamos son extrapolables a anchuras de defecto mayores, pues la variación de este parámetro desplaza la longitud de onda donde se dan las resonancias y vamos a discutir sobre la intensidad de la señal, no sobre su espectro.

Tal como se refleja en las gráficas de 3.3.5, llega un punto en el aumento de  $\delta$  (en torno a  $\delta = -0,7$  tanto en  $N = 1$  como en  $N = 2$ ) en el que la reflexión llega a 1 en el pico principal y provoca un truncamiento del mismo, de forma que hay una banda (de unos  $4 \mu\text{m}$ ) en la cual la reflexión es prácticamente 1. Así, esta saturación en la reflexión podría utilizarse como un filtro pasa-banda pues, para un cierto rango de longitudes de onda, la mayor parte de la radiación se refleja y no atraviesa el defecto.

## 5. Apéndice

### 5.1. Propiedades de la base de modos TM y TE

En esa sección vamos a probar unas propiedades importantes de los vectores de la base

$$\mathbf{a}_p = \frac{1}{k_{\parallel}} \begin{pmatrix} k_x \\ k_y \end{pmatrix} \text{ (Modo transversal magnético)} \quad \mathbf{a}_s = \frac{1}{k_{\parallel}} \begin{pmatrix} -k_y \\ k_x \end{pmatrix} \text{ (Modo transversal eléctrico)}$$

con  $\mathbf{k} = k_x \hat{u}_x + k_y \hat{u}_y + k_z \hat{u}_z$  y  $k_{\parallel}^2 = k_x^2 + k_y^2$ . Probemos las diferentes propiedades:

#### ■ Ortonormalidad

$$\mathbf{a}_p \cdot \mathbf{a}_s = \frac{1}{k_{\parallel}^2} (-k_x k_y + k_y k_x) = 0.$$

$$\mathbf{a}_p \cdot \mathbf{a}_p = \frac{1}{k_{\parallel}^2} (k_x^2 + k_y^2) = \frac{k_{\parallel}^2}{k_{\parallel}^2} = 1.$$

$$\mathbf{a}_s \cdot \mathbf{a}_s = \frac{1}{k_{\parallel}^2} (k_y^2 + k_x^2) = \frac{k_{\parallel}^2}{k_{\parallel}^2} = 1,$$

donde hemos usado la definición de producto escalar euclídeo en  $\mathbb{R}^2$  (Si  $\mathbf{a}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^2$ , se define  $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \sum_{i=1}^2 a_i b_i$ ). Vemos, en resumen, que

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_j = \delta_{ij} \quad \text{con } i, j \in \{s, p\}.$$

#### ■ Componente z del campo eléctrico

Si llamamos  $E_{\parallel}$  a la componente de campo que se proyecta en el subespacio  $\mathbb{R}^2$  generado por los vectores  $\mathbf{a}_s$  y  $\mathbf{a}_p$ , podemos calcular a partir de  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{E} = 0$  (que se cumple para ondas planas, tal como hemos probado en 1.2.1), entonces para cada modo transversal:

TM:  $\mathbf{E}_p = E_{\parallel} \mathbf{a}_p + E_z \hat{u}_z$ .

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{E} \Rightarrow \mathbf{k} \cdot (E_{\parallel} \mathbf{a}_p + E_z \hat{u}_z) = 0 \Rightarrow E_{\parallel} \left[ \frac{1}{k_{\parallel}} (k_x^2 + k_y^2) \right] + E_z k_z = 0 \Rightarrow E_{\parallel} \frac{k_{\parallel}^2}{k_{\parallel}} + E_z k_z = 0 \Rightarrow \boxed{E_z^p = -E_{\parallel} \frac{k_{\parallel}}{k_z}}$$

TE:  $\mathbf{E}_s = E_{\parallel} \mathbf{a}_s + E_z \hat{u}_z$ .

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{E} = 0 \Rightarrow \mathbf{k} \cdot (E_{\parallel} \mathbf{a}_s + E_z \hat{u}_z) = 0 \Rightarrow E_{\parallel} \left[ \frac{1}{k_{\parallel}} (-k_x k_y + k_x k_y) \right] + E_z k_z = 0 \Rightarrow \boxed{E_z^s = 0}$$

■ **Relación entre  $\mathbf{H}$  y  $\mathbf{E}$ ; impedancias**

Partimos de la ley de Lentz (2)

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}.$$

Vamos a extraer propiedades para  $\mathbf{E}_{\mathbf{p}} = E_{\parallel}^s \mathbf{a}_s + E_z^s$ ,  $\mathbf{E}_{\mathbf{p}} = E_{\parallel}^p \mathbf{a}_p + E_z^p$ ,  $\mathbf{H}_s = H_{\parallel}^s \mathbf{a}_s + H_z^s$  y  $\mathbf{H}_{\mathbf{p}} = H_{\parallel}^p \mathbf{a}_p + H_z^p$ , de modo que éstas son ondas planas, es decir  $A_{\parallel} \propto e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\omega t)}$ , con  $A_{\parallel} = E_{\parallel}^{\mu}$ ,  $H_{\parallel}^{\mu}$  y  $\mu$  el modo ( $s$  ó  $p$ ). Debido a esta dependencia, se tiene que  $\frac{\partial A_{\parallel}}{\partial t} = -i\omega A_{\parallel}$ , o sea que

$$\nabla \times \mathbf{E} = \frac{i\omega}{c} \mathbf{H}.$$

Veamos ahora qué obtenemos para cada polarización:

TE(s)

En este caso tendremos  $\mathbf{E} = E_{\parallel} \mathbf{a}_s + 0\hat{u}_z$ , con  $E_{\parallel} \propto e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ , de modo que

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{E} &= \begin{vmatrix} \hat{u}_x & \hat{u}_y & \hat{u}_z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ -\frac{E_{\parallel} k_y}{k_{\parallel}} & \frac{E_{\parallel} k_x}{k_{\parallel}} & 0 \end{vmatrix} = \hat{u}_x \left[ -\frac{E_{\parallel} k_x}{k_{\parallel}} i k_z \right] - \hat{u}_y \left[ \frac{E_{\parallel} k_y}{k_{\parallel}} i k_z \right] + A \hat{u}_z = \\ &= -iE_{\parallel} \left( \frac{k_z k_x}{k_{\parallel}} \hat{u}_x + \frac{k_y k_z}{k_{\parallel}} \hat{u}_y + A' \hat{u}_z \right). \end{aligned}$$

La componente  $z$  ( $A$ ) no nos interesa, porque ahora vamos a aplicar a este resultado  $\hat{u}_z \times$ , a lo que tal componente no aporta nada:

$$\begin{aligned} \hat{u}_z \times (\nabla \times \mathbf{E}) &= -iE_{\parallel} \begin{vmatrix} \hat{u}_x & \hat{u}_y & \hat{u}_z \\ 0 & 0 & 1 \\ \frac{k_z k_x}{k_{\parallel}} & \frac{k_y k_z}{k_{\parallel}} & A' \end{vmatrix} = -iE_{\parallel} \left( -\frac{k_y k_z}{k_{\parallel}} \hat{u}_x + \frac{k_z k_x}{k_{\parallel}} \hat{u}_y \right) = -ik_z \left( -E_{\parallel} \frac{k_y}{k_{\parallel}} + E_{\parallel} \frac{k_x}{k_{\parallel}} \hat{u}_y \right) = \\ &= -ik_z \mathbf{E}^{TE}. \end{aligned}$$

Si llevamos esto a la ecuación de Lentz (aplicando  $\hat{u}_z \times$  a ambos lados):

$$-ik_z \mathbf{E}^{TE} = i \frac{\omega}{c} \hat{u}_z \times \mathbf{H}^{TE}.$$

Si tomamos  $g = \frac{\omega}{c}$  y el vector de ondas normalizado en el vacío  $q_z = \frac{k_z}{g}$ , se tiene que:

$$\boxed{-\hat{u}_z \times \mathbf{H}^{TE} = q_z \mathbf{E}^{TE} = Y_{qp} \mathbf{E}^{TE}},$$

donde

$$\boxed{Y_{qp} = q_z}$$

TM(p)

En este caso tenemos  $\mathbf{E} = \mathbf{E}^{TM} - \frac{E_{\parallel} k_{\parallel}}{k_z}$ . Seguimos el mismo procedimiento (sabiendo que, al hacer el rotacional, ignoramos la parte de  $z$  pues luego haremos  $\hat{u}_z \times$ ).

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{E} &= \begin{vmatrix} \hat{u}_x & \hat{u}_y & \hat{u}_z \\ \frac{\partial_x}{E_{\parallel} k_x} & \frac{\partial_y}{E_{\parallel} k_y} & \frac{\partial_z}{E_{\parallel} k_{\parallel}} \end{vmatrix} = \hat{u}_x \left( -i \frac{E_{\parallel} k_y k_{\parallel}}{k_z} - i \frac{E_{\parallel} k_y k_z}{k_{\parallel}} \right) - \hat{u}_y \left( -i E_{\parallel} \frac{k_{\parallel} k_x}{k_z} - i E_{\parallel} \frac{k_x k_z}{k_{\parallel}} \right) + A \hat{u}_z = \\ &= i E_{\parallel} \left[ -\hat{u}_x \left( \frac{k_y k_{\parallel}}{k_z} + \frac{k_y k_z}{k_{\parallel}} \right) + \hat{u}_y \left( \frac{k_x k_{\parallel}}{k_z} + \frac{k_x k_z}{k_{\parallel}} \right) \right]. \end{aligned}$$

En cada componente tenemos una expresión análoga. Tomemos  $k_{\sigma} = k_x$  ó  $k_y$ :

$$\frac{k_{\sigma} k_{\parallel}}{k_z} + \frac{k_{\sigma} k_z}{k_{\parallel}} = \frac{k_{\sigma} k_{\parallel}^2 + k_{\sigma} k_z^2}{k_z k_{\parallel}} = \frac{k_{\sigma} g^2}{k_z k_{\parallel}} = \frac{k_{\sigma}}{k_{\parallel}} q_z g.$$

Así

$$\nabla \times \mathbf{E} = i \frac{q_z g E_{\parallel}}{k_{\parallel}} (-\hat{u}_x k_y + \hat{u}_y k_x) + A \hat{u}_z.$$

Si ahora aplicamos  $\hat{u}_z \times$  a esta expresión:

$$\hat{u}_z \times (\nabla \times \mathbf{E}) = i g q_z \frac{E_{\parallel}}{k_{\parallel}} \begin{vmatrix} \hat{u}_x & \hat{u}_y & \hat{u}_z \\ 0 & 0 & 1 \\ -k_y & k_x & A' \end{vmatrix} = i g q_z \frac{E_{\parallel}}{k_{\parallel}} (-\hat{u}_x k_x - \hat{u}_y k_y) = -i g q_z \mathbf{E}^{TM}.$$

Aplicamos en la ecuación de Lentz queda

$$-i g q_z \mathbf{E}^{TM} = i \frac{\omega}{c} \hat{u}_z \times \mathbf{H}^{TM} \Rightarrow \boxed{-\hat{u}_z \times \mathbf{H}^{TM} = \frac{1}{q_z} \mathbf{E}^{TM} = Y_{qp} \mathbf{E}^{TM}}$$

Con

$$\boxed{Y_{qp} = \frac{1}{q_z}}$$

## 5.2. Cálculo de la transformada de fourier en el defecto Gaussiano

Vamos a resolver la transformada de fourier de un defecto gaussiano:

$$\Delta \alpha_0(x) = \delta \alpha_g e^{-\frac{4x^2}{a^2}}.$$

Si planteamos la transformada de fourier mediante 20

$$\Delta \alpha_0(q) = \frac{1}{\lambda} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i q g x} \Delta \alpha_0(x) dx \Rightarrow \Delta \alpha(q) = \frac{1}{\lambda} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta \alpha_g e^{-i q g x} e^{-\frac{4x^2}{a^2}}.$$

Si completamos cuadrados en el exponente de la exponencial:

$$\begin{aligned}\Delta\alpha_0(q) &= \frac{\delta\alpha_g}{\lambda} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(-\frac{4x^2}{a^2} - igqx\right) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left\{-\left(\frac{4x^2}{a^2} + 2 \cdot \frac{2x}{a} \frac{iqga}{4} - \frac{q^2 g^2 a^2}{16} + \frac{q^2 g^2 a^2}{16}\right)\right\} = \\ &= \exp\left(-\frac{q^2 g^2 a^2}{16}\right) \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left\{-\left(\frac{2x}{a} + \frac{iqg}{4a}\right)^2\right\}\end{aligned}$$

Si en la integral que queda hacemos el cambio  $u = \frac{2x}{a} + \frac{iqg}{4a} \Rightarrow du = \frac{2}{a}dx$  y teniendo en cuenta que  $\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-x^2} = \sqrt{\pi}$  (Ver 5.5):

$$\Delta\alpha_0(q) = \frac{1}{\lambda} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-iqgx} \Delta\alpha_0(x) dx = \delta\alpha_g \frac{\tilde{a}}{4\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{q^2 \tilde{a}^2}{16}\right),$$

con  $\tilde{a} = ga$ .

### 5.3. Cálculo de coeficiente de reflexión $R$

El estudio de este coeficiente (junto con el de transmisión  $T$  y escape  $S$ ) se detalla en el material suplementario de [15]. El origen de estos coeficientes viene considerar el campo en la lámina de grafeno transmitiéndose por el plasmón, dado por la fórmula

$$E(x) = e^{iq_p g x} + \int_{-\infty}^{+\infty} dq \frac{B(q)}{Y(q) + \alpha_g} e^{igqx} = e^{iq_p g x} + \int_{-\infty}^{+\infty} dq B(q) G(q) e^{igqx}.$$

Lo que planteamos es lo siguiente: queremos conocer el campo que se refleja y transmite por el defecto, es decir, el campo a una distancia arbitrariamente grande del defecto en ambos sentidos, o sea  $x \rightarrow \pm\infty$  (Onda de reflejada si  $x \rightarrow -\infty$  y onda transmitida si  $x \rightarrow +\infty$ . Para este cálculo nos basaremos en la expresión aquí presentada, pero haremos la asunción de que la transformada de fourier de la amplitud  $B(q)$  es una función suave (es decir, sin polos) de  $q$ , de modo que, en el infinito, el mayor aporte lo dará la función de Green  $G(q)$  que, en el caso de los modos TM (que son los que se propagan en la lámina como plasmones):

$$G(q) = \frac{q_z}{1 + \alpha_g q_z},$$

donde se ha empleado la impedancia  $Y_{qp}$  ya calculada en 5.1. Se puede ver (ver Apéndice, apartado 5.4) que una integral el producto de una función  $f(q)$  sin polos con la función de Green  $G(q)$  tiene como resultado

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} dq G(q) f(q) = \frac{i2\pi}{q_p \alpha_g^3} f(q_p),$$

con  $q_p$  donde tenemos el polo. Si aplicamos esto al campo eléctrico, tenemos, por ejemplo, que

$$\lim_{x \rightarrow +\infty} E(x) = \lim_{x \rightarrow +\infty} \left\{ e^{iq_p g x} + \int_{-\infty}^{+\infty} dq B(q) G(q) e^{igqx} \right\} = \lim_{x \rightarrow +\infty} \left\{ e^{ik_p x} + \frac{B(q_p) e^{ik_p x} 2\pi i}{q_p \alpha_g^3} \right\} = e^{ik_p x} (1 + \tau),$$

con  $\tau = \frac{2\pi i}{\alpha_g^3 q_p} B(q_p)$ . Hemos asumido que  $\text{Im} q_p > 0$ , de modo que el término exponencial convergerá. Un tratamiento análogo nos llevara a que

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} E(x) = e^{ik_p x} + \rho e^{-ik_p x},$$

con  $\rho = \frac{2\pi i}{\alpha_g^3 q_p} B(-q_p)$ . De este modo, los coeficientes de reflexión y transmisión se definen como

$$R = |\rho|^2 = \left| \frac{2\pi i}{\alpha_g} B(-q_p) \right|^2 \quad T = |1 + \tau|^2 = R = |\rho|^2 = \left| 1 + \frac{2\pi i}{\alpha_g} B(q_p) \right|^2$$

#### 5.4. Cálculo de integrales con la función de Green

Vamos a plantear el cálculo de una integral del tipo

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} dq G(q) f(q) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f(q) dq}{Y_q + \alpha_g}.$$

La función de Green puede expresarse también como:

$$G(q) = \frac{1}{Y_q + \alpha_g} = \frac{1}{\frac{1}{q_z} + \alpha_g} = \frac{q_z}{q_z + \alpha_g},$$

donde sólo tenemos en cuenta los modos confinados en la superficie (es decir, los TM). Tenemos que tener en cuenta que  $q_z = \sqrt{1 - q^2}$ . Para hacer esta integral nos valdremos del teorema de los residuos de Cauchy, que establece para un recorrido cerrado:

$$\oint f(z) dz = 2\pi i \sum \text{Re}(f(z_0), z_0),$$

donde la suma se extiende a los distintos polos situados en  $z_0$  (distintos puntos) donde la función  $f(z)$  tiene polos. Si tenemos en cuenta esto y asumiendo que nuestra  $f(q)$  no tendrá polos, tratemos de calcular

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dq}{1 + q_z \alpha_g}$$

a través de sus polos. Tal función tiene polos en  $q_{zp} = -\frac{1}{\alpha_g}$ . A los polos en la variable  $q$  lo llamamos  $q_p$ . Si en la integral hacemos el cambio de variable  $q = q_p - x$  (Así tendremos polos en  $x = 0$ :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dq}{1 + q_z \alpha_g} = \frac{-\infty}{+\infty} \frac{dx}{1 + \sqrt{1 - (q_p - x)^2} \alpha_g},$$

donde hemos empleado que  $q_z = \sqrt{1 - q^2}$ . Si asumimos que  $x \ll 1$ , desarrollando la raíz:

$$\sqrt{1 - (q_p - x)^2} = \sqrt{1 - q_p^2 - x^2 + 2xq_p} \approx \sqrt{1 - q_p^2 + 2xq_p}.$$



Si ahora sacamos factor común  $(1 - q_p^2) = q_{pz}$ :

$$\sqrt{1 - q_p^2 + 2xq_p} = \sqrt{(1 - q_p^2)\left(1 - \frac{2xq_p}{1 - q_p^2}\right)} = q_{pz}\sqrt{1 - \frac{2xq_p}{q_{pz}}}.$$

Considerando que, si  $x \ll 1$  entonces  $\sqrt{1 - x} = 1 - \frac{x}{2}$ , el denominador queda como:

$$1 + q_{zp}\left(1 - \frac{xq_p}{q_{zp}^2}\right)\alpha_g = 1 + q_{zp}\alpha_g - \frac{xq_p\alpha_g}{q_{zp}}.$$

Como  $q_{zp} = -\frac{1}{\alpha_g} \Rightarrow 1 + q_{zp}\alpha_g = 0$ , el numerador queda como  $-\frac{xq_p\alpha_g}{q_{zp}}$  y la integral a resolver es

$$\int_{+\infty}^{-\infty} \frac{dx}{-x} \frac{q_{zp}}{q_p\alpha_g} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{x} \frac{q_{zp}}{q_p\alpha_g}.$$

Si le aplicamos el teorema de los residuos en el cero (que es donde está el polo):

$$\frac{q_{zp}}{q_p\alpha_g} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{x} = \frac{q_{zp}}{q_p\alpha_g} 2\pi i \lim_{x \rightarrow 0} (x - 0) \frac{1}{x} = 2\pi i \frac{q_{zp}}{q_p\alpha_g}.$$

Si lo juntamos con lo anterior, el resultado es

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} G(q)f(q)dq = \frac{2\pi i}{q_p\alpha_g^3} f(q_p)$$

## 5.5. Cálculo de la integral de una gaussiana

En este apartado vamos a calcular el valor  $I = \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-x^2}$ . Para ello, si consideramos el cuadrado de esta cantidad, tendremos la siguiente integral doble:

$$I^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-x^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dy e^{-y^2}.$$

Si pasamos a coordenadas polares, donde  $r^2 = x^2 + y^2$ ,  $dx dy = r dr d\theta$  y los extremos de integración pasan a ser  $r$  de 0 a  $+\infty$  y  $\theta$  de 0 a  $2\pi$ . De este modo:

$$I^2 = \int_{r=0}^{+\infty} \int_{\theta=0}^{2\pi} r e^{-r^2} dr d\theta = 2\pi \int_{r=0}^{+\infty} r e^{-r^2} dr = 2\pi \left[ -\frac{1}{2} e^{-r^2} \right]_0^{+\infty} = 2\pi.$$

O sea que, como  $I^2 = 2\pi$ ,

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-x^2} = \sqrt{2\pi}.$$

## 5.6. Cálculo de la suma geométrica

En este apartado vamos a calcular el valor  $S = \sum_{n=0}^N r^n$ . Consideremos lo siguiente:

$$S = 1 + r + \dots + r^N$$

$$rS = r + r^2 + \dots + r^{N+1}$$

Si hacemos ahora  $rS - S$ :

$$rS - S = S(r - 1) = r^{N+1} - 1 \Rightarrow S = \sum_{n=0}^N r^n = \frac{r^{N+1} - 1}{r - 1}$$

## 5.7. Cálculo del máximo de reflexión en FOBA

Recordando la forma del coeficiente de reflexión en FOBA para una gaussiana:

$$R_O^{FOBA} = \delta^2 \frac{\pi}{4} (k_p a)^2 \delta^2 \exp \left\{ -\frac{1}{2} (k_p a)^2 \right\}.$$

Si ahora escribimos  $k_p = \frac{2\pi}{\lambda}$  y sustituimos luego  $x = \left( \frac{a}{\lambda_p} \right)^2$ , tenemos:

$$R_0^{FOBA}(\lambda_p) = \delta^2 \frac{\pi}{4} \left( 2\pi \frac{a}{\lambda_p} \right)^2 \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left( 2\pi \frac{a}{\lambda_p} \right)^2 \right\} \Rightarrow R_0^{FOBA}(x) = \delta^2 \pi^3 x \exp \{-2\pi x\}.$$

Si ahora derivamos respecto de  $x$  e igualamos a cero:

$$\frac{\partial R_0^{FOBA}(x)}{\partial x} = 0 \Rightarrow \pi^3 \delta^3 (e^{-2\pi x} - 2\pi x e^{-2\pi x}) = 0 \Rightarrow 1 - 2\pi x = 0 \Rightarrow x = \frac{1}{2\pi}.$$

Si deshacemos el cambio de variable:

$$x = \frac{1}{2\pi} \Rightarrow \frac{a}{\lambda_p} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}.$$

Aquí tenemos un extremo. Para saber si es un máximo o un mínimo deberíamos hacer la segunda derivada. No obstante, si sustituimos en la expresión y ésta no se anula (pues el valor mínimo que alcanza el factor de reflexión es cero), será un máximo:

$$R_0^{FOBA} \left( \frac{a}{\lambda_p} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \right) = \frac{\delta^2 \pi^2}{2} \frac{1}{e} \approx 0,58 \delta^2.$$

## 5.8. Código MatLab

Aquí se presenta el código MatLab empleado para las simulaciones, concretamente para el caso  $N = 2, a = 20 \text{ nm}, \delta = -0,2$  y  $\gamma = 2$ . Este código ha sido desarrollado (para el caso de un defecto gaussiano) por Pablo Pons<sup>9</sup>, estudiante de doctorado en el departamento de Física de la Materia Condensada en la Universidad de Zaragoza. Las modificaciones realizadas para el caso de las  $N$  gaussianas se han comentado en la sección (3.3.1). Las simulaciones se han realizado en el *cluster* del Instituto de investigación de bio-computación y Física de Sistemas Complejos (BiFi) con distintos códigos como éste, variando los distintos parámetros que se han estudiado en la sección 3.3.

```
function main
%# echo(delta,a)

% Physical constants
c=2.99792458e8; %[m/s] speed of light
h=4.135667516e-15; %[eV] planck's constant
eps0=8.8541878176e-12; %[F/m] vacuum permittivity
e=-1.602176565e-19; %[C] electron charge
%

%FEM Parameters
N1=1000; % number of values calculated between qmax and qp+e1
N2=600; % ... qp+e2 and qp-e2; should be an even number to split points in two regions
N22=600; % ...
N3=300; % ... qp-e2 and 1+e1
N4=300; % ... 1+e1 and 1-e1; should be an even number to avoid 1 zero
N5=300; % ... 1-e1 and 0
N=N1+N2+N22+N3+N4+N5; %
e1=0.33; % half range for zone 4
e2=4; % half range for zone 2
e3=150; % times the real part of the pole for half range for zone 2.2
f3=1000000; %
qmf=1; %
%

% Graphene parameters
mu=0.2; %[eV] chemical potential
delta=-0.2;
%delta=str2num(delta); % defect Depth [-1:0]
a=20e-9;
%a=str2num(a); %[m] defect Width
%

%Many gaussian parameters

NumGauss=2; %Number of gaussian distributions we are using.
gamma=2; %The distance between two adjacent gaussians is d=gamma*a, thus gamma measure how
      much are each gaussian separated one from another.

% Spectra range
Nk=130; % number of points evaluated (at least 2)
lmin=5e-6; % minimum vacuum wavelength
lmax=22e-6; % maximum vacuum wavelength
%

% Reflexion and vacuum wavelength vector definition
R=zeros(Nk,1); % Reflexion (should be [0:1])
```

<sup>9</sup>Contacto: pons@unizar.es

```

lf=zeros(Nk:1); % Vacuum wavelength
%
sout=sprintf('C:/TFG/d0.%da%N%lg%d_R.txt',-delta*10,a*10^9,NumGauss,gamma);
sbq=sprintf('C:/TFG/d0.%da%N%lg%d_Bq.txt',-delta*10,a*10^9,NumGauss,gamma);
% Opening files
output = fopen(sout, 'w');
Bq =fopen(sbq, 'w');
%
for k=1:Nk
    % Operation Point
    lambda=lmin+(lmax-lmin)/(Nk-1)*(k-1); %vacuum wavelength
    omega=c/lambda*2*pi; % angular frequency
    g=omega/c; % vacuum wavevector
    sigma=pi*e^2/(2*h*abs(e))*sqrt(-1)*(8*mu/(h*omega)-1/(2*pi)*log((2*mu+h*omega/(2*pi))^2/(2*mu-h*omega/(2*pi))^2)); %conductivity
    alphaG=sigma/(2*eps0*c); %normalized conductivity
    alphaG=1i*imag(alphaG)+imag(alphaG)/f3; %
    qp=sqrt(1-1/alphaG^2); % graphene normalized wavevector (without defects)
    qpz=imag(sqrt(1-qp^2))/abs(imag(sqrt(1-qp^2)))*sqrt(1-qp^2); %
    qpmax=qmf*20*sqrt(2)/(a*g)+2*real(qp); %maximum wavevector
    %

    % Matrix/vector definition
    Ml=zeros(2*N,2*N); %
    M=zeros(2*N,2*N); %M matrix (Ml*G)
    F=zeros(2*N,1); % Independent terms vector (FOBA)
    B=zeros(2*N,1); % Field vector
    G=zeros(2*N,2*N); %
    Gl=zeros(2*N,1); %
    Ql=zeros(2*N,2*N); %
    q=zeros(2*N,1); % normalized wavevector
    qz=zeros(2*N,1); %
    dq=zeros(2*N,1); %
    %

    % q and dq vectors generator
    for i=1:N1 % zone 1
        q(i)=-qpmax+(qpmax-real(qp)-e2)/N1*(i-0.5);
        q(i+N+N5+N4+N3+N2+N22)=real(qp)+e2+(qpmax-real(qp)-e2)/N1*(i-0.5);
        dq(i)=(qpmax-real(qp)-e2)/N1;
        dq(i+N+N5+N4+N3+N2+N22)=(qpmax-real(qp)-e2)/N1;
    end
    for i=1:N2/2 % zone 2
        q(i+N1)=-real(qp)-e2+(e2-abs(imag(qp))*e3)/N2*2*(i-0.5);
        q(i+N1+N2/2+N22)=-real(qp)+abs(imag(qp))*e3+(e2-abs(imag(qp))*e3)/N2*2*(i-0.5);
        q(i+N+N5+N4+N3)=-real(qp)-e2+(e2-abs(imag(qp))*e3)/N2*2*(i-0.5);
        q(i+N+N5+N4+N3+N2/2+N22)=real(qp)+abs(imag(qp))*e3+(e2-abs(imag(qp))*e3)/N2*2*(i-0.5);
        dq(i+N1)=(e2-abs(imag(qp))*e3)/N2*2;
        dq(i+N1+N2/2+N22)=(e2-abs(imag(qp))*e3)/N2*2;
        dq(i+N+N5+N4+N3)=(e2-abs(imag(qp))*e3)/N2*2;
        dq(i+N+N5+N4+N3+N2/2+N22)=(e2-abs(imag(qp))*e3)/N2*2;
    end
    for i=1:N22 % zone 22
        q(i+N1+N2/2)=-real(qp)-abs(imag(qp))*e3+2*abs(imag(qp))*e3/N22*(i-0.5);
        q(i+N+N5+N4+N3+N2/2)=real(qp)-abs(imag(qp))*e3+2*abs(imag(qp))*e3/N22*(i-0.5);
        dq(i+N1+N2/2)=2*abs(imag(qp))*e3/N22;
        dq(i+N+N5+N4+N3+N2/2)=2*abs(imag(qp))*e3/N22;
    end
    for i=1:N3 % zone 3

```

```

q(i+N1+N2+N22)=-real(qp)+e2+(real(qp)-e2-1-e1)/N3*(i-0.5);
q(i+N+N5+N4)=1+e1+(real(qp)-e2-1-e1)/N3*(i-0.5);
dq(i+N1+N2+N22)=(real(qp)-e2-1-e1)/N3;
dq(i+N+N5+N4)=(real(qp)-e2-1-e1)/N3;
end
for i=1:N4 % zone 4
q(i+N1+N2+N22+N3)=-1-e1+2*e1/N4*(i-0.5);
q(i+N+N5)=1-e1+2*e1/N4*(i-0.5);
dq(i+N1+N2+N22+N3)=2*e1/N4;
dq(i+N+N5)=2*e1/N4;
end
for i=1:N5 % zone 5
q(i+N1+N2+N22+N3+N4)=-1+e1+(1-e1)/N5*(i-0.5);
q(i+N)=(1-e1)/N5*(i-0.5);
dq(i+N1+N2+N22+N3+N4)=(1-e1)/N5;
dq(i+N)=(1-e1)/N5;
end
%
%qz vector generator
for i=1:2*N
qz(i)=sqrt(1-q(i)^2);
end
%
%Theory
%
% Integral
% B(q)=-\Delta\alpha(q-q_p)-\int_{-\infty}^{\infty}\Delta\alpha(q-q')G(q')B(q')dq'
%
% FEM
% \Delta\alpha(q-q_p)=\sum_{q'=-q_{max}}^{q_{max}}[-\delta_{q,q'}-\Delta\alpha(q-q')G(q')]\Delta q'B(q')
% F=[M]*B
%
% F vector and M matrix generator
for i=1:2*N
if rem(gamma*(real(q(i))-real(qp))*g*a/2,pi)==0
F(i)=1/(4*sqrt(pi))*alphaG*g*a*exp(-(q(i)-qp)^2*(a*g)^2/16)*delta*NumGauss;
else
F(i)=1/(4*sqrt(pi))*alphaG*g*a*exp(-(q(i)-qp)^2*(a*g)^2/16)*delta*exp(-1i*gamma*(q(i)-qp)*a*g*(NumGauss-1)/2)*sin(NumGauss*gamma*(q(i)-qp)*a*g/2)/sin(gamma*(q(i)-qp)*a*g/2);
end
G(i,i)=qz(i)/(1+alphaG*qz(i))*dq(i);
G1(i)=qz(i)/(1+alphaG*qz(i));
Q1(i,i)=1;
end
% For any reason, M matrix is generated faster whether it is defined as the
% product of two matrix
for i=1:2*N;
for j=1:2*N;
if rem(gamma*(real(q(i))-real(q(j)))*g*a/2,pi)==0
M1(i,j)=-1/(4*sqrt(pi))*alphaG*a*g*exp(-(q(i)-q(j))^2*(a*g)^2/16)*delta*NumGauss;
else
M1(i,j)=-1/(4*sqrt(pi))*alphaG*a*g*exp(-(q(i)-q(j))^2*(a*g)^2/16)*delta*exp(-1i

```

```

        *gamma*(q(i)-q(j))*a*g*(NumGauss-1)/2)*sin(NumGauss*gamma*(q(i)-q(j))*a*g
        /2)/sin(gamma*(q(i)-q(j))*a*g/2);
    end
end
M=M1*G;
for i=1:2*N
    M(i,i)=M(i,i)-1;
end
%
%Solve field B
% B=M\F;
%
%
S1=0;
for i=1:N4+N5
    S1=S1+dq(N-(N4+N5)/2+i)/qz(N-(N4+N5)/2+i)*abs(G1(N-(N4+N5)/2+i)*B(N-(N4+N5)/2+i))
    ^2;
end
S1=S1*4*pi/real(qp)/abs(alphaG)^3
%
%
lf(k)=lambda;
B(N1+N2/2+N22/2)
B(2*N-N1-N2/2+N22/2+1)
R1=abs(-2*pi*(B(N1+N2/2+N22/2)+B(N1+N2/2+N22/2+1))/2)*sqrt(-1)/(alphaG^3*qp))^2
T1=abs(1-2*pi*(B(2*N-N1-N2/2-N22/2)+B(2*N-N1-N2/2-N22/2-1))*sqrt(-1)/2/(alphaG^3*qp))^2
R(k)=R1;
plot(real(q),real(B),real(q),imag(B),real(q),imag(F))
%
% Writing files
for i=1:2*N
    fprintf(Bq, '%e\t%e\t%e\t%e\t%e\n', lf(k), q(i), real(B(i)), imag(B(i)), imag(F(i))
    );
end
fprintf(Bq, '\n');
fprintf(output, '%e\t%e\t%e\t%e\t%e\n', lf(k), real(qp)/g, R(k), T1, S1);
%
end
plot(lf,R)
disp('Simulation is over!');
% Closing files
fclose(output);
fclose(Bq);
%
end

```

## Referencias

- [1] Debije, P; Scherrer, P. Interferenz an regellos orientierten Teilchen im Röntgenlicht I. *Physikalische Zeitschrift* 1916, 17: 277.
- [2] Wallace, P. R. The Band Structure of Graphite. *Physical Review* 1947, 71: 622-634
- [3] Mouras, S.; et al. Synthesis of first stage graphite intercalation compounds with fluorides. *Revue de Chimie Minerale* 1987, 24: 572.
- [4] Ruess, G.; Vogt, F. Höchstlamellarer Kohlenstoff aus Graphitoxhydroxyd. *Monatshefte für Chemie* 1948, 78 (3 4): 222.
- [5] Boehm, H. P.; Clauss, A.; Fischer, G.; Hofmann, U. Proceedings of the Fifth Conference on Carbon. *Pergamon Press*. 1962
- [6] Oshima, C.; Nagashima, A. Ultra-thin epitaxial films of graphite and hexagonal boron nitride on solid surfaces. *J. Phys.: Condens. Matter* 1997.
- [7] Novoselov, K. S.; Geim, A. K.; Morozov, S. V.; Jiang, D.; Zhang, Y.; Dubonos, S. V.; Grigorieva, I. V.; Firsov, A. A. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films *Science* 2004, 306 (5696): 666-669. arXiv:cond-mat/0410550. Bibcode:2004Sci...306..666N. doi:10.1126/science.1102896. PMID 15499015.
- [8] Tsoukleri G.; Parthenios, J., Papagelis, K.; Jalil, R., Ferrari, A.C.; Geim, A.K.; Novoselov K. S. and Galotis, C. Subjecting a graphene monolayer to tension and compression.
- [9] Castro Neto et al. The electronic properties of graphene
- [10] Pop et al., Thermal properties of graphene: Fundamentals and applications.
- [11] Jackson J.D. Classical electrodynamics. 3<sup>a</sup> edición. EEUU: *John Wiley & Sons*, 1962.
- [12] Sánchez-Gil, J.A.; Maradudin, A.A. Near-Field and Far-Field Scattering of Surface Plasmon Polaritons by One-Dimensional Surface Defects. *Phys. Rev. B* 1999, 60, 8359-8367.
- [13] E. Collett, Field Guide to Polarization, SPIE Field Guides vol. FG05, SPIE (2005). ISBN 0-8194-5868-6.
- [14] Nikitin, A. Yu.; Guinea, F.; García-Vidal, F.J.; Martín-Moreno, L., Fields radiated by a nanoemitter in a graphene sheet. *Physical Review B* 84, 195446, 2011, App A.
- [15] García-Pomar, J.L; Yu. Nikitin A y Martin-Moreno L. Scattering of Graphene Plasmons by Defects in the graphene Sheet. 2013.
- [16] Nagase, M; Hibino, H; Kageshima, H.; Yamaguchi, H. Local conductance measurements of Double-Layer Graphene on SiC substrate. *Nanotechnology* 2009, 20, 445704
- [17] Gorbachev, R.V.; Mayorov, A. S.; Savchenko, A.K.; Horsell, D.W.; Guinea, F. Conductance of p-n-p Graphene Structures with Air-Bridge Top Gates. *Nano Lett.* 2008, 8, 1995-1999.
- [18] Liu, G; Jairo Velasco, J.; Bao, W.; Lau, C.N. Fabrication of Graphene p-n-p Junctions with Contactless Top Gates *Appl. Phys. Lett.* 2008, 92, 203103.